

# 重力と熱流下における粒子集団の様相

理学部理学科物理学コース 学籍番号 20S2035Y 山本 凜

2023 年 11 月 14 日

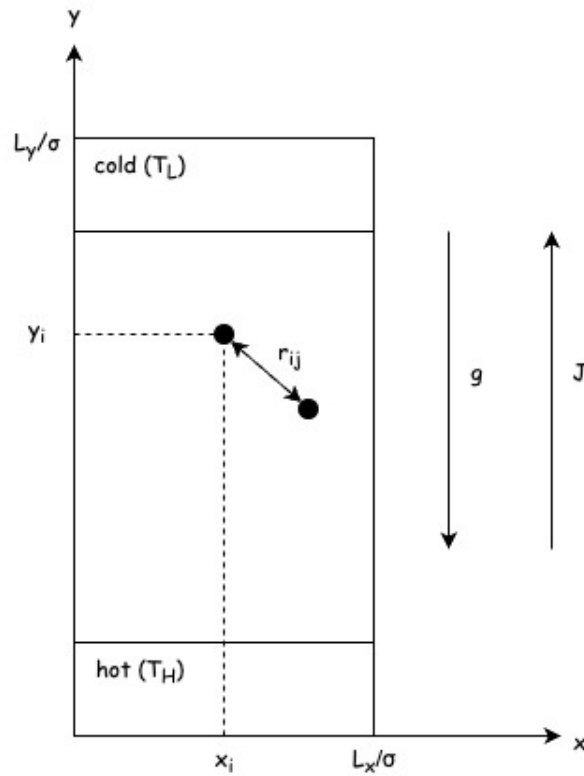
## 目次

1	系の設定	3
1.1	ハミルトニアン	3
1.1.1	粒子-粒子間相互作用ポテンシャル	4
1.1.2	周期境界条件と最近接イメージ規約	4
1.1.3	壁-粒子間相互作用ポテンシャル	5
1.2	熱流	8
1.3	温度制御	8
2	追実験	10
2.1	先行研究の設定	10
3	コレクション	10
3.1	$R_a$ , $R_t$	12
付録 A	ソースコード	12

## 1 系の設定

2次元の気液共存系で, 質量  $m$  の粒子が  $N$  個存在することを考え, 系の上下には壁, 左右には周期境界条件を課す. また, 重力を  $y$  軸正の向きにかけて, 熱流を  $y$  軸負の向きに流す. この熱流は, 系の上下の領域にそれぞれ異なる温度を設定した langevin 熱浴を使用することによってかけることとし, NVT-MD シミュレーションを実行する. また, 各熱浴の  $y$  幅は  $8\sigma$  となるように設定する. (図 1)

図 1



### 1.1 ハミルトニアン

結論は,

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right]. \quad (1.1.1)$$

### 1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル

典型的な粒子間相互作用ポテンシャルとして, 12-6 Lennard-Jones Potential を採用する.

$$\phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r; \varepsilon, \sigma) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

カットオフ長  $r_{\text{cut}}^{\text{pair}} = 3\sigma$  とポテンシャルのシフトアップを考慮して

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r; r_{\text{cut}}^{\text{pair}}) = \left\{ \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r) - \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{\text{cut}}^{\text{pair}}) \right\} \theta(r_{\text{cut}}^{\text{pair}} - r)$$

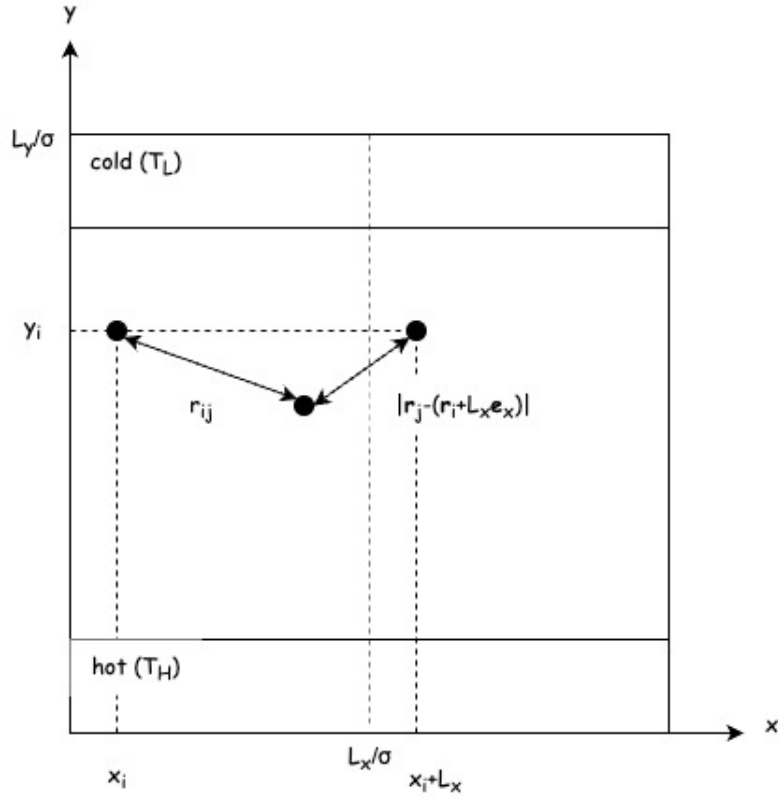
### 1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約

周期境界条件を考慮すると, 粒子-粒子間相互作用ポテンシャルの総計はまず以下のように書ける.

$$\sum_{n_x \in \mathbb{Z}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i \text{ for } n_x=0)}}^N \frac{1}{2} \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(|\mathbf{r}_i - (\mathbf{r}_j + L_x \mathbf{e}_x)|)$$

ここで,  $n_x = 0$  のオリジナルセルの中では, 同じ  $i, j$  ペアのポテンシャルエネルギーを 2 回足すことになるので, ポテンシャルを 1/2 している. その上で,  $j = i$  の場合は自分自身との相互作用になるため, これは除外する.  $n_x \neq 0$  の場合は, 粒子  $j$  はイメージ粒子となるので,  $j = i$  の場合も含める. この場合にもダブルカウントがあるので, ポテンシャルを 1/2 する.

図 2



また、注目する系の粒子が常にオリジナルセルの中にとどまっているかのように MD 上で扱うには、

$$x_i = x'_i \bmod L_x$$

のように、飛び出した粒子の  $x$  座標  $x'_i$  を上式のように  $x_i$  にシフトすれば良い。しかし、周期境界条件とセットにして、最近接イメージ規約として、粒子  $i$  がオリジナル粒子と各イメージ粒子の中で最も近い粒子  $j$  らとのみ相互作用をすることを考えると、粒子間の相互ポテンシャルはより簡単に書けるようになる。

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij})$$

### 1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル

$$\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}) = 4\varepsilon^{\text{wall}} \left[ \left( \frac{\sigma^{\text{wall}}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma^{\text{wall}}}{r} \right)^6 \right]$$

パラメータは

$$\begin{aligned}\varepsilon^{\text{wall}} &= (1.0 - R_d) \times \varepsilon \\ \sigma^{\text{wall}} &= (0.5 + R_t) \times \sigma \\ r_{\text{cut}}^{\text{wall}} &= \left(2^{1/6} + R_a\right) \times \sigma^{\text{wall}}\end{aligned}$$

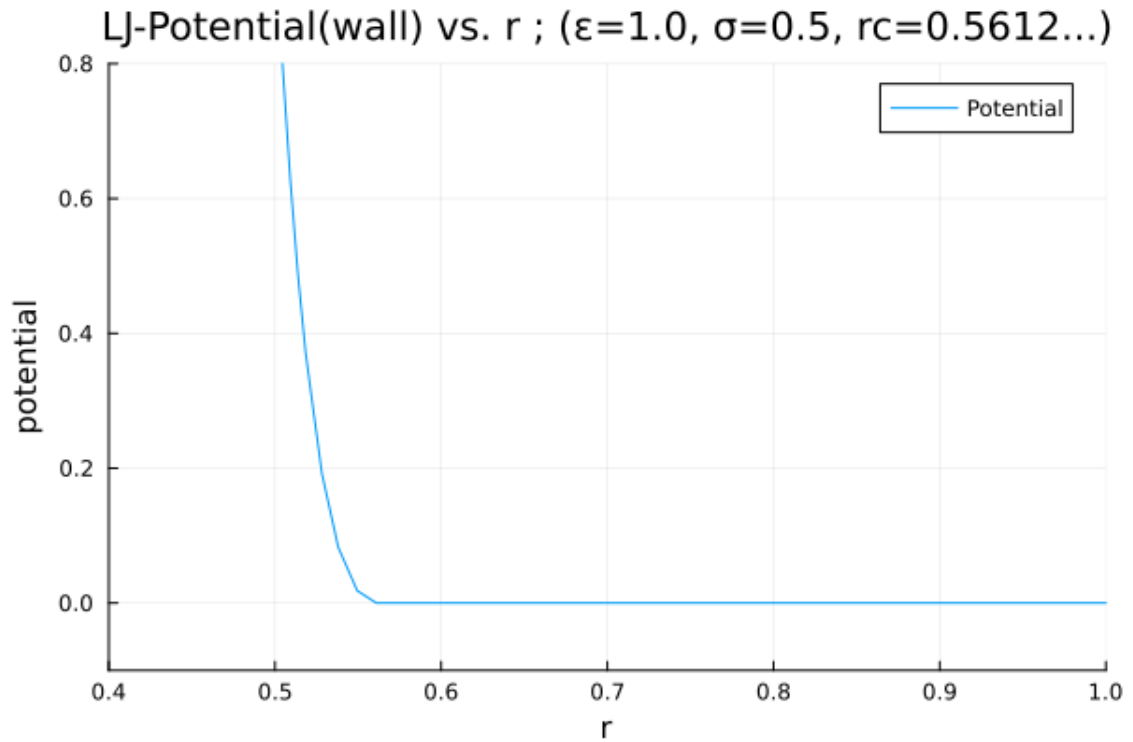
カットオフ長とシフトアップを考慮して

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r; r_{\text{cut}}^{\text{wall}}) = \{\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r) - \phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r_{\text{cut}}^{\text{wall}})\} \theta(r_{\text{cut}}^{\text{wall}} - r)$$

このポテンシャルも図示したい.

まず  $r_{\text{attractive}} = 0.0$ , つまりカットオフ長  $r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 0.5612\dots$  のときは, 図 3 が示すように WCA ポテンシャルとなる.

図 3



また, 参考のために,  $r_{\text{cut}}^{\text{wall}}$  が  $2^{1/6}\sigma^{\text{wall}} = 0.5612\dots$  から  $3\sigma^{\text{wall}} = 1.5$  を超えるまで,  $c_{\text{attractive}}$  を 0.0 から 2.0 まで 0.2 ずつ増やした壁-粒子間の相互ポテンシャルの同時プロットを図示する.(図 4, 図 5)

图 4

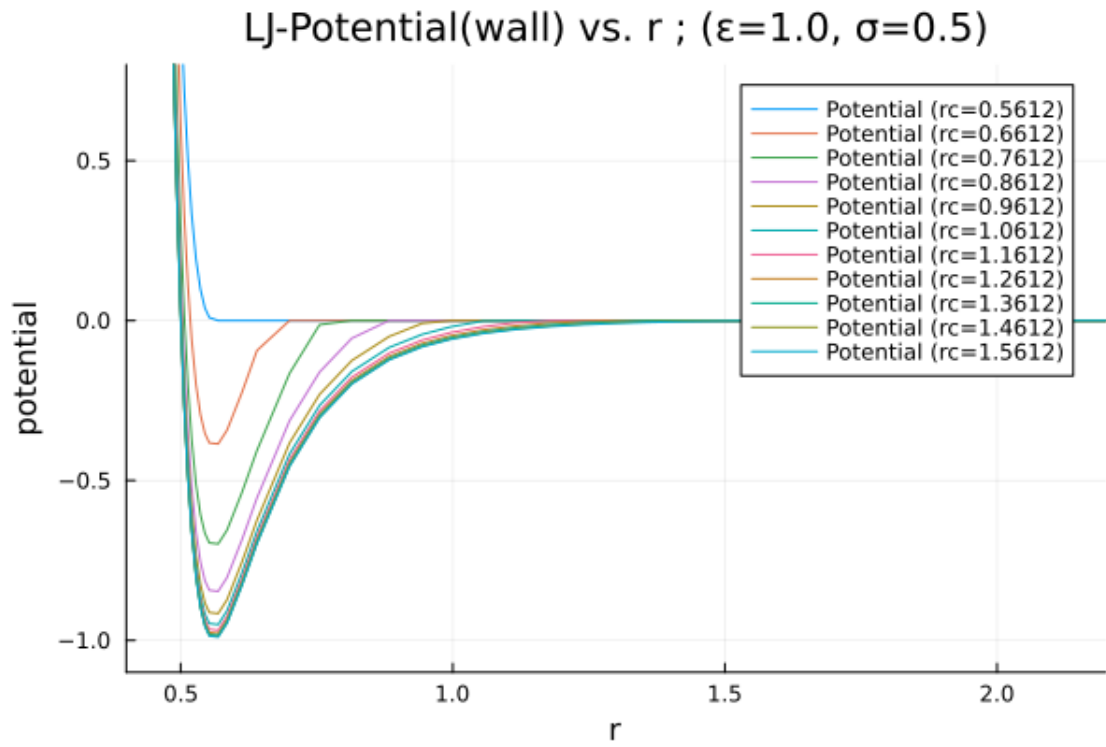


图 5 zoom

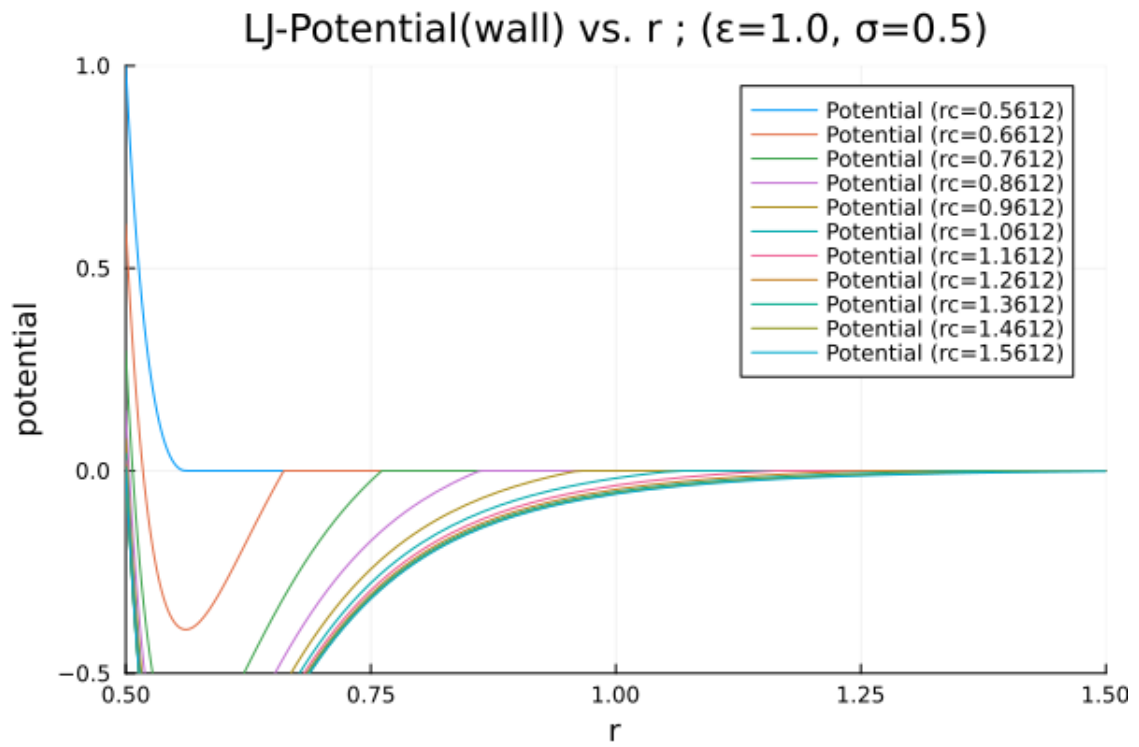


図5からもわかるように,  $r = r_{\text{cut}}^{\text{wall}}$  となるときには微分不可能であることに留意する必要がある.  
このことから, 壁ポテンシャルは

$$V^{\text{wall}}(y; L_y) = \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(y; r_{\text{cut}}^{\text{wall}}) + \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(L_y - y; r_{\text{cut}}^{\text{wall}})$$

周期境界条件を考慮した系のハミルトニアンは以下のように書き表せる.

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \quad (1.1.1)$$

## 1.2 熱流

langevin 熱浴に侵入した粒子に対しては, brownian 動力学計算を実行する ([https://docs.lammps.org/fix\\_langevin.html](https://docs.lammps.org/fix_langevin.html)). その粒子  $i$  にはたらく力  $\mathbf{F}_i$  は LAMMPS のドキュメントに則った形式だと以下のよう書き表せる.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= \mathbf{F}_i^c + \mathbf{F}_i^f + \mathbf{F}_i^r \\ \mathbf{F}_i^c &= -\nabla \left[ \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \\ \mathbf{F}_i^f &= -\frac{m_i}{\text{damp}} \mathbf{v}_i \\ \mathbf{F}_i^r &\propto \sqrt{\frac{k_{\text{B}} T m_i}{dt \text{damp}}} \end{aligned}$$

それぞれの力の説明を記す.

- $\mathbf{F}^c$ ; ポテンシャルを介して計算される力
- $\mathbf{F}^f$ ; 摩擦力
- $\mathbf{F}^r$ ; ランダム力

## 1.3 温度制御

2d kinetic temperature

$$T \equiv \frac{1}{Nk_{\text{B}}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

粒子  $i$  が熱浴に侵入すると, その粒子の運動はランジュバン方程式に従う. 侵入していないときは,  $\gamma = 0$  になり, 正準方程式に等しくなる.



$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \\
\dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \sqrt{2\gamma k_B T_\nu} \boldsymbol{\xi}_i(t) \\
\langle \xi_i^a(t) \rangle &= 0 \\
\langle \xi_i^a(t) \xi_j^b(t') \rangle &= \delta_{i,j} \delta_{a,b} \delta(t - t')
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma(y_i) &= 1. \quad T_\nu(y_i) = T_{\text{H}}. \quad (0 < y_i < 8\sigma) \\
\gamma(y_i) &= 1. \quad T_\nu(y_i) = T_{\text{C}}. \quad (L_y - 8\sigma < y_i < L_y) \\
\gamma(y_i) &= 0. \quad T_\nu(y_i) = T. \quad (8\sigma < y_i < L_y - 8\sigma)
\end{aligned}$$

## 2 追実験

雨が降るシミュレーションを再現したい. 壁を完全に濡らしていることを考えたいので,  $\sigma^{\text{wall}} = 1.0 \neq 0.5$  とする.

また, 系の両端のポテンシャルエネルギー差  $mgL_y$  と運動エネルギー差  $k_B\Delta T$  の比を  $\chi$  として以下のようにする.

$$\chi \equiv \frac{k_B\Delta T}{mgL_y} = 1.265$$

### 2.1 先行研究の設定

重力をかけた状態で緩和するまでシミュレーションを行う.

- $N = 5000$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 79.0 \dots$
- $L_y/\sigma = 158.1 \dots$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg = 2.0 \times 10^{-4}$
- $\sim t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$

重力をかけた緩和後の系で, 熱浴の温度差を以下のようにつけて, 熱流を流して実行をする.

- $\chi = k_B\Delta T/mgL_y = 1.265$
- $k_B\Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $\sim t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$

## 3 コレクション

壁ポテンシャルまわりのパラメーターを 3 つ用意する.

$R_d$ : 乾き具合.

$R_t$ : 壁の厚み.

$R_a$ : 濡れ具合.

これに伴い, 壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルは以下のように書き表せるようになる.

$$\begin{aligned}\varepsilon^{\text{wall}} &= (1.0 - R_d) \times \varepsilon \\ \sigma^{\text{wall}} &= (0.5 + R_t) \times \sigma \\ r_{\text{cut}}^{\text{wall}} &= \left(2^{1/6} + R_a\right) \times \sigma^{\text{wall}}\end{aligned}$$

新たなパラメータ ( $R_d, R_t, R_a$ ) を変えて, 壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルを変えたときにどのように粒子集団の様相が変化するかをみる. 以降の実験は基本的に以下のパラメータに近い値で行うものとする.

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 40$
- $L_y/\sigma = 80$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon = 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 1.0 \times 10^5$

まずは, ( $R_d = 0.0, R_t = 0.5, R_a = 3.0 - 2^{1/6}$ ) で実験を行う. これは, ( $\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon, \sigma^{\text{wall}} = \sigma, r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3\sigma^{\text{wall}}$ ) に対応しているので,  $\phi_{\text{LJ}} = \phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}$  ということになり, 追実験と同じ結果を得る. このときには, 壁の厚みが  $0.5\sigma$  で壁が十分に濡れていると考える.

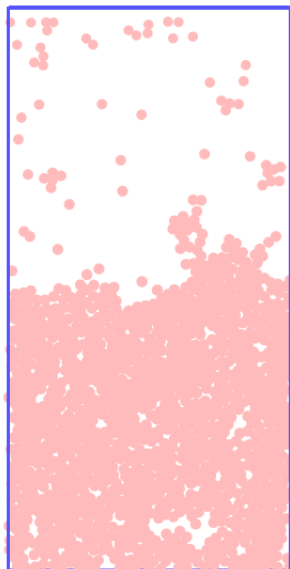


図 6 Ay50\_rho0.4\_T0.43\_dT0.04\_Rd0.0\_Rt0.5\_Ra1.877538\_g0.0004\_run2.0e7

重心位置をスケーリングして, 時系列プロットすると,

### 3.1 $R_a$ , $R_t$

$R_a$  を

## 付録 A ソースコード

ソースコード 1 in.vdw\_mod

```
1 # 2d Lennard-Jones
2
3
```

```

4 # 出力関係のパラメータ
5 variable run equal PLACEHOLDER_run
6 variable thermo equal ${run}/1000 # 分母の数がlogで生成される行数になる.
7 variable dump equal ${run}/1000 # 分母の数がlammppstrjで生成される行数になる.
8 variable image_step equal ${run}/4 # 分母の数+1枚の画像を作成.
9
10 # 重要なパラメータ
11 variable SEED equal 202035
12 variable Ay equal PLACEHOLDER_Ay # 粒子生成に用いるy方向でのセル数.
13 variable Ax equal ${Ay}/2 # 粒子生成に用いるx方向でのセル数.
14 variable rho equal PLACEHOLDER_rho # 密度. 密度と粒子数から体積が決まる.
15 variable trange equal 8 # 各熱浴の幅.
16 variable gap equal 0.5 # boxとcatomのずれ. ずらさないと粒子が消えてしまう.
17 # lo,hi が単に座標の小さい大きいであることに注意.
18 variable T equal PLACEHOLDER_T # 各熱浴の目標温度の中間, これを初期温度に設定.
19 variable dT equal PLACEHOLDER_dT
20 variable tlo equal ${T}+(${dT})/2 # 座標の小さい方の熱浴の目標温度.
21 variable thi equal ${T}-${dT}/2 # 座標の大きい方の熱浴の目標温度.
22 variable g equal PLACEHOLDER_g # 重力加速度.
23 # 粒子-粒子間のLJポテンシャル
24 variable epsilon_pair equal 1.0 # LJポテンシャルのepsilon; ポテンシャルの深さ.
25 variable sigma_pair equal 1.0 # LJポテンシャルのsigma; 衝突直径.
26 variable rc_pair equal 3.0 # 典型的なカットオフ長.
27 # 壁-粒子間のLJポテンシャル
28 # variable r_thickness equal PLACEHOLDER_rt # 壁の厚みに相当する.
29 # variable r_attractive equal PLACEHOLDER_ra # 引力ポテンシャルに影響.
30 variable epsilon_wall equal 1.0 # LJポテンシャルのepsilon; ポテンシャルの深さ.
31 variable sigma_wall equal 1.0 # LJポテンシャルのsigma; 衝突直径.
32 variable rc_wall equal 3.0 # WCAポテンシャルになるようなカットオフ長+alpha*
    sigma_wall.
33
34 # 領域関係のパラメータ
35 # 縦長のとき
36 variable box_xlo equal 0 # xの小さい方の直線.
37 variable box_xhi equal ${Ax} # xの大きい方の直線.
38 variable box_ylo equal -${gap} # yの小さい方の直線.
39 variable box_yhi equal ${Ay}-${gap} # yの大きい方の直線.
40 variable coldlo equal -${gap} # 熱浴で温度の低い方の小さい方の直線.
41 variable coldhi equal -${gap}+${trange} # 熱浴で温度の低い方の大きい方の直線.
42 variable hotlo equal ${Ay}-${gap}-${trange} # 熱浴で温度の高い方の小さい方の直線.
43 variable hothi equal ${Ay}-${gap} # 熱浴で温度の高い方の大きい方の直線.
44 # # 横長のとき
45 # variable box_xlo equal -${gap}
46 # variable box_xhi equal ${Ax}-${gap}
47 # variable box_ylo equal 0
48 # variable box_yhi equal ${Ay}

```

```

49 # variable coldlo equal -${gap}
50 # variable coldhi equal -${gap}+${trange}
51 # variable hotlo equal ${Ay}-${gap}-${trange}
52 # variable hothi equal ${Ay}-${gap}
53
54
55 # 系の設定
56 units lj # LJ 単位系.
57 atom_style atomic # 粒子.
58 dimension 2 # 次元.
59 timestep 0.005 # MD シミュレーションの timestep.
60 boundary p f p # x=l,y=m,z=n の直線が周期境界条件.
61 lattice sq ${rho} # 粒子の初期配置. sq; 正方形セルの左隅に 1つ置く.
62 region box block ${box_xlo} ${box_xhi} ${box_ylo} ${box_yhi} -0.1 0.1 # 系の領域
    設定.
63 region catom block 0 ${Ax} 0 ${Ay} -0.1 0.1 # 粒子生成の領域設定.
64 create_box 1 box # 系の生成.
65 create_atoms 1 region catom # 粒子の生成.
66 mass 1 1.0 # 粒子の設定.
67 velocity all create ${T} ${SEED} dist gaussian # 粒子に温度
    t を目標とする初期速度をガウス分布に従って与える.
68
69 # 縦長のとき
70 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 熱浴Cの領域.
71 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 熱浴Hの領域.
72 # # 横長のとき
73 # region cold block ${coldlo} ${coldhi} INF INF -0.1 0.1 # 冷たい熱浴の領域.
74 # region hot block ${hotlo} ${hothi} INF INF -0.1 0.1 # 暖かい熱浴の領域.
75
76 # 各熱浴領域の温度を計算
77 compute Tcold all temp/region cold # c_Tcold で cold 熱浴領域の温度を取得.
78 compute Thot all temp/region hot # c_Tcold で cold 熱浴領域の温度を取得.
79
80 # 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル
81 pair_style lj/cut ${rc_pair}
82 pair_coeff 1 1 ${epsilon_pair} ${sigma_pair} ${rc_pair}
83 pair_modify shift yes # ポテンシャルエネルギーが 0 になる距離がカットオフ長になるように全
    体的にシフトアップする.
84
85 # 高速化コマンド. neighbor list に入れる距離指定.
86 neighbor 0.3 bin
87 neigh_modify every 1 delay 0 check yes
88
89 # システムに他の操作がない場合に nve アンサンブルに一致するだけで, 今回の系は langevin 熱浴
    を用いた nvt アンサンブルであることに注意.
90 fix 1 all nve

```

```

91
92 # 壁-粒子間相互作用ポテンシャル
93 # 縦長のとき
94 fix wallylo all wall/lj126 ylo EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall} ${rc_wall}
    units box pbc yes
95 fix wallyhi all wall/lj126 yhi EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall} ${rc_wall}
    units box pbc yes
96 # # 横長のとき
97 # fix wallxlo all wall/lj126 xlo EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall} ${rc_wall}
    units box pbc yes
98 # fix wallxhi all wall/lj126 xhi EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall} ${rc_wall}
    units box pbc yes
99
100 # langevin 熱浴
101 fix hot all langevin ${T} ${T} 1.0 ${SEED} tally no # 熱浴
    Hが温度 T になるようにする.
102 fix cold all langevin ${T} ${T} 1.0 ${SEED} tally no # 熱浴
    Cが温度 T になるようにする.
103 fix_modify hot temp Thot
104 fix_modify cold temp Tcold
105
106 # 重力場
107 fix Gravity all gravity ${g} vector 0 -1 0
108
109 run 90000 # t が tau になるまで実行.
110
111 unfix hot # 熱浴H についての設定の解除.
112 unfix cold # 熱浴C についての設定の解除.
113
114 fix hot all langevin ${tlo} ${tlo} 1.0 ${SEED} tally no # 熱浴が温度
    tlo になるようにする.
115 fix cold all langevin ${thi} ${thi} 1.0 ${SEED} tally no # 熱浴が温度
    thi になるようにする.
116 fix_modify hot temp Thot
117 fix_modify cold temp Tcold
118
119
120 # 重心計算 (Center of Mass)
121 compute CoM all com # c_CoM[1] でXg, c_CoM[2] でYg を取得.
122
123
124 # 出力コマンド
125 # VMD
126 dump id all custom ${dump} output.lammpstrj id x y vx vy
127
128 # 画像

```

```

129 dump 2 all image ${image_step} image.*.jpg type type
130 dump_modify 2 pad 3
131
132 # YAML
133 fix extra all print ${thermo} ""
134   _timestep:_(step)
135   _temp:_(temp)
136   _pe:_(pe)
137   _TotE:_(etotal)
138   _xg:_(c_CoM[2])
139   _Tcold:_(c_Tcold)
140   _Thot:_(c_Thot)"" file output.yaml screen no
141
142 # log
143 thermo_style custom step temp pe etotal c_CoM[2] c_Tcold c_Thot # 出力する物理量.
144
145 # 一次元プロファイル(今は温度と密度だけ計算と出力)
146 compute chunk all chunk/atom bin/1d y lower 3.0 units box
147 fix tempp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file temp_profile.profile
148 fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/number file rho_profile.
  profile
149
150 thermo ${thermo} # 熱力学量の出力.
151 thermo_modify norm no # 示量的な熱力学量に調整.
152
153 run ${run} # 実行.

```

#### ソースコード 2 lammps\_modexe.jl

```

1  #=
2  lammps ファイルの実行及び出力ファイルの保管.
3  - lammps ファイルを適切にパラメータ処理する必要がある.
4  - lammps ファイル実行時に出力される*.log ファイル,*.yaml ファイルが指定した同一フォルダに
    ,それぞれのフォルダを作成して保管される.
5  - lammps ファイルと同一ディレクトリにある*.lammprj ファイルは削除.
6  - パラメータごとにlammps ファイルを編集して繰り返し実行させる.
7  =#
8
9  using Glob # *を使ってパターンマッチングするためのパッケージ.
10 using Dates #日時を取得するパッケージ.
11
12 lammpsfile = glob("in.*")[1] # 実行ファイルを指定.
13 file_list = ["log", "yaml", "lammprj"] # 扱う出力ファイルの拡張子.
14 outputpath = "/Users/2023_2gou/Desktop/r_yamamoto/Research/outputdir" # 出力ディ
    レクトリのパス.
15 remark_text="rain"
16

```



```

17  #=
18  パラメータを指定.
19  各パラメータの要素数の積数回分だけlammps が実行されるので大きくしすぎないように注意.
20  =#
21  Ay_range = range(50,length=1) # 偶数にする.
22  rho_range = range(0.4,length=1) # 密度.
23  T_range = range(0.43,length=1) # 初期温度.
24  dT_range = range(0.04,length=1) # 熱浴の温度の差.
25  g_range = range(4e-4,length=1) # 重力.
26  # rt_range = range(0.0,length=1) # 壁の厚み.
27  # ra_range = range(3.0-1.122462,length=1) # 濡れ具合.
28  run_range= range(1e7,length=1) # run step.
29
30  # 多重ループを用いてパラメータごとに実験を実行.
31  for Ay in Ay_range,
32      rho in rho_range,
33      T in T_range,
34      dT in dT_range,
35      g in g_range,
36      # rt in rt_range,
37      # ra in ra_range,
38      run_value in run_range # 変数をrun にしてしまうと julia の run('')と競合してしまう.
39
40      template_script = read(lammpsfile, String) # lammps ファイルを読み込む.
41      # パラメータ編集.
42      mod_script = replace(template_script,
43          "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay),
44          "PLACEHOLDER_rho" => string(rho),
45          "PLACEHOLDER_T" => string(T),
46          "PLACEHOLDER_dT" => string(dT),
47          "PLACEHOLDER_g" => string(g),
48          # "PLACEHOLDER_rt" => string(rt),
49          # "PLACEHOLDER_ra" => string(ra),
50          "PLACEHOLDER_run" => string(run_value)
51      )
52
53      tempfile = "in.temp_script" # 仮lammps ファイル.
54      fp = open(tempfile, "w") # 仮ファイルを作成して開く.
55      write(fp, mod_script) # 仮ファイルにパラメータを書き込む.
56      close(fp)
57
58      n = string(now()) # 実験日時の記録.
59      parameter = "Ay$(Ay)_rho$(rho)_T$(T)_dT$(dT)_g$(g)_run$(run_value)"
60      run(`mpirun -n 4 lmp_mpi -log output.log -in $(tempfile)`) # lammps の実行.
61      run(`rm $(tempfile)`) # 仮ファイルを削除.
62

```

```

63 # 出力ファイルの保管.
64 for file in file_list
65
66     # 読み込みに失敗したら次のループに進む.
67     try
68         readfile = glob("output.$(file)") [1] # 読み込みファイルを指定.
69         script = read(readfile, String) # 読み込みファイルを読み込む.
70         writepath = joinpath(outputpath, "$(file)dir", "$(n)_$(remark_text)$(
            parameter)_$(readfile)") # 書き込みファイルの絶対パス.
71         fp = open(writepath, "w") # 書き込みファイルを作成して開く.
72
73         if file == "log" # log ファイルのとき.
74             println(fp, "実験日時:␣$(n)") # 実験日時の書き込み.
75             println(fp, parameter) # コピー用.
76             println(fp, "備考欄:␣$(remark_text)") # 特別なことをした時の書き込み.
77             rm(readfile)
78         end
79
80         write(fp, script) # 読み込んだテキストを書き込む.
81         close(fp) # 書き込みファイルを閉じる.
82
83         if file == "yaml" # yaml ファイルのとき.
84             rm(readfile)
85         end
86
87         if file == "lampoostrj" # lampoostrj ファイルのとき.
88             rm(readfile) # lampoostrj ファイルは重いので、移動後は削除.
89         end
90
91     catch
92
93     end
94 end
95
96 end

```

#### ソースコード 3 LJpotential\_pair.jl

```

1 # LJ ポテンシャル(粒子-粒子)の描画.
2
3 # パッケージ
4 using Plots
5
6 # パラメータ
7 epsilon_pair = 1.0
8 sigma_pair = 1.0
9 rc_pair = 2.5 * sigma_pair

```

```

10
11 # 階段関数の定義.
12 function theta(r)
13     if r <= 0
14         y = 0
15         return y
16     elseif r > 0
17         y = 1
18         return y
19     end
20 end
21
22 # LJ ポテンシャルの定義.
23 function phi(r)
24     if r > 0.0
25         y = 4.0 * epsilon_pair * ((sigma_pair/r)^12 - (sigma_pair/r)^6)
26         return y
27     elseif r >= 0.0
28         y = 0
29         return y
30     end
31 end
32
33 # シフトアップを考慮したLJ ポテンシャルの定義.
34 function phi_tilde(r)
35     y = (phi(r)-phi(rc_pair))*theta(rc_pair - r)
36 end
37
38 plot(phi_tilde, xlims=(0.75,3.1), ylims=(-2,3), label="Potential", xlabel="r",
39     ylabel="potential", title="LJ-Potential(pair) vs. r; (ε=1.0, σ=1.0, rc
40     =2.5)")
41
42 # plot(phi_tilde, xlims=(0.4,1.0), ylims=(-0.1,0.8), label="Potential", xlabel="
43     r", ylabel="potential", title="LJ-Potential vs. r()")

```

#### ソースコード 4 LJpotential\_wall.jl

```

1 # LJ ポテンシャル(壁-粒子)の描画.
2
3 # パッケージ
4 using Plots
5
6 # パラメータ
7 r_thickness = 0.0 # 壁の厚み
8 r_attractive = 0.0 # 引力壁
9
10 epsilon = 1.0
11 sigma = 0.5 + r_thickness

```

```

12 rc = 1.122462 * sigma + r_attractive
13
14 # 階段関数の定義.
15 function theta(r)
16     if r <= 0
17         y = 0
18         return y
19     elseif r > 0
20         y = 1
21         return y
22     end
23 end
24
25 # LJ ポテンシャルの定義.
26 function phi(r)
27     if r > 0.0 # 0 < r < rc_pair.
28         y = 4.0 * epsilon * ((sigma/r)^12 - (sigma/r)^6)
29         return y
30     elseif r >= 0.0 # r >= 0 , rc_pair =< r.
31         y = 0
32         return y
33     end
34 end
35
36 # シフトアップを考慮したLJ ポテンシャルの定義.
37 function phi_tilde(r)
38     y = (phi(r)-phi(rc))*theta(rc - r)
39 end
40
41 # plot(phi_tilde, xlims=(0.75,3.1), ylims=(-2,3), label="Potential", xlabel="r",
42     ylabel="potential", title="LJ-Potential vs. r()")
43 plot(phi_tilde, xlims=(0.4,1.0), ylims=(-0.1,0.8), label="Potential", xlabel="r"
44     , ylabel="potential", title="LJ-Potential(wall) vs. r; (ε=1.0, σ=0.5, rc
45     =1.12...)")

```

ソースコード 5 iLJpotential\_wall\_rc.jl

```

1 # LJ ポテンシャル(壁-粒子)の描画.
2 # c_attractive を変えて同時プロット.
3
4 # パッケージ
5 using Plots
6
7 # パラメータ
8 r_thickness = 0.0 # 壁の厚み
9 r_attractive_list = range(0.0, 2.0, step=0.2) # 引力壁について
10

```

```

11 epsilon_wall = 1.0
12 sigma_wall = 0.5 + r_thickness
13
14 # 階段関数の定義.
15 function theta(r)
16     if r <= 0
17         y = 0
18         return y
19     elseif r > 0
20         y = 1
21         return y
22     end
23 end
24
25 # LJ ポテンシャルの定義.
26 function phi(r)
27     if r > 0.0 # 0 < r < rc_pair.
28         y = 4.0 * epsilon_wall * ((sigma_wall/r)^12 - (sigma_wall/r)^6)
29         return y
30     elseif r <= 0.0
31         y = 0
32         return y
33     end
34 end
35
36 plt=plot()
37 for r_attractive in r_attractive_list
38
39     rc=(1.122462 + r_attractive) * sigma_wall
40
41     # シフトアップを考慮したLJ ポテンシャルの定義.
42     function phi_tilde(r)
43         y = (phi(r)-phi(rc))*theta(rc - r)
44     end
45
46     plot!(
47         phi_tilde, xlims=(0.4,2.2), ylims=(-1.1,0.8), # normal
48         # phi_tilde, xlims=(0.5,1.5), ylims=(-0.5,1), # zoom
49         label="Potential_␣(rc=$(round(rc,␣digits=4)))", xlabel="r",
50         ylabel="potential", title="LJ-Potential(wall)_␣vs._␣r_␣;_␣(ε=1.0,␣σ=0.5)")
51 end
52 plot(plt)

```