

学士学位論文
壁の濡れ性が誘起する、重力と熱流をかけた流体
系のダイナミクスの変化

山本 凜 *1

最終更新日: 2024 年 3 月 11 日
2023 年度 (令和 5 年)

*1 茨城大学 理学部理学科物理学コース 20S2035Y

目次

概要	4
第 1 章 系の設定	5
1.1 ハミルトニアン	6
1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル	6
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約	6
1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル	8
1.2 熱流	8
第 2 章 実験の設定	10
2.1 重力と熱流を同時にかける	14
2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける	18
2.3 重力のみをかける	19
2.4 熱流のみをかける	20
2.5 重力と熱流を同時にかける（時間 10 倍）	22
2.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）	23
第 3 章 分析と考察	25
3.1 重心位置	25
3.2 定常過程	28
3.3 リミットサイクル	28
第 4 章 まとめ	30
4.1 壁の濡れ性と周期的なダイナミクス	30
謝辞	30
付録 A 研究手法	32
A.1 LAMMPS	32
A.2 Lennard-Jones potential	32

付録 B	分析画像	33
B.1	ヒストグラム	33
B.1.1	重力と熱流を同時にかける	33
B.1.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	35
B.1.3	重力のみをかける	36
B.1.4	熱流のみをかける	37
B.1.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	38
B.1.6	重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)	39
B.2	空間的な揺らぎ	39
B.2.1	重力と熱流を同時にかける	40
B.2.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	41
B.2.3	重力のみをかける	42
B.2.4	熱流のみをかける	43
B.2.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	44
B.2.6	重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)	45
B.3	サイクル	46
B.3.1	重力と熱流を同時にかける	46
B.3.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	47
B.3.3	重力のみをかける	48
B.3.4	熱流のみをかける	49
B.3.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	50
B.3.6	重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)	51
B.4	サイクル 3d	52
B.4.1	重力と熱流を同時にかける	52
B.4.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	53
B.4.3	重力のみをかける	54
B.4.4	熱流のみをかける	55
B.4.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	56
B.4.6	重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)	57
B.5	ヒートマップ	58
B.5.1	重力と熱流を同時にかける	58
B.5.2	重力を先にかけて、熱流を後からかける	59
B.5.3	重力のみをかける	60
B.5.4	熱流のみをかける	61
B.5.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	62

B.5.6 重力を先にかけて, 热流を後からかける (10 倍)	63
付録 C ソースコード	64
C.1 LAMMPS ファイル	64
C.2 実行ファイル	73
C.3 プロットファイル	79
参考文献	82

概要

やかんに火をかけて、湯を沸かすときのことを考えてほしい。やかんのフタには蒸気を逃すために穴が空いているが、それを塞ぐと、やかんの底よりも冷たいフタの裏に細かい水滴が付き、ある程度集まって塊となったらその水滴がポチャンと落ちる様子が想像できるだろう。先行研究によれば、フタの裏が強く濡れ性（親水性）を持っていると、流体系は非定常で周期的なダイナミクスを示す。それは、「フタの裏付近での水蒸気形成、フタへの水の吸着、そして水の落下」を繰り返すというものである。本研究では、内部の水がフタの裏に引っ付いたり、落ちたりということを繰り返すことに対して興味を持ち、数値実験を用いて、その繰り返しに周期性があるか、そのフタの性質によって繰り返しの仕方に変化が生まれるかを調べた。

具体的には、上下に濡れた壁がつき、下向きに重力がかかり、温度差をつけた熱浴を上下に設定することで、上向きに熱流を流すことを考えた流体系を設計した。（ただし、重力の強さと熱流の大きさを特徴づけるパラメータ mgL_y と $k_B\Delta T$ の比を 1 程度としている。）壁の濡れ性をパラメータ制御して、分子動力学計算を用いて数値実験を行い、系の重心位置と空間的なばらつきに焦点を当てて分析すると、周期的なダイナミクスがはっきりと現れる系では、両者は相空間上で比較的安定した半円の閉軌道を描くことが分かった。（図 1）さらに、壁の濡れ性を強くしたときに、周期的なダイナミクスがより顕著に現れることも明らかになった。

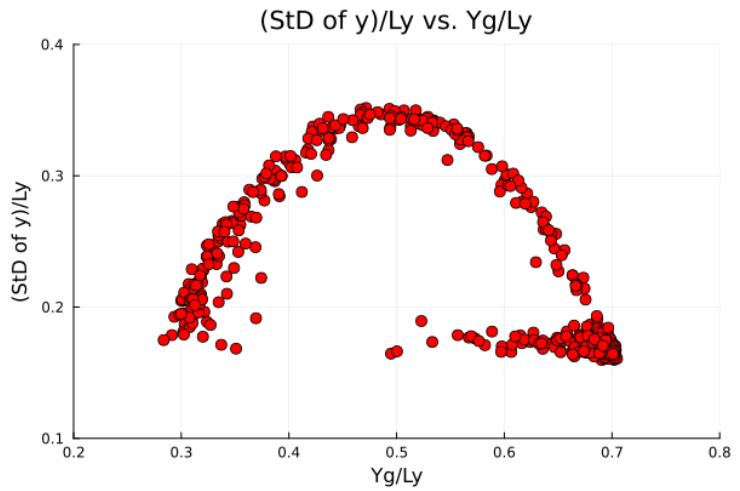


図 1

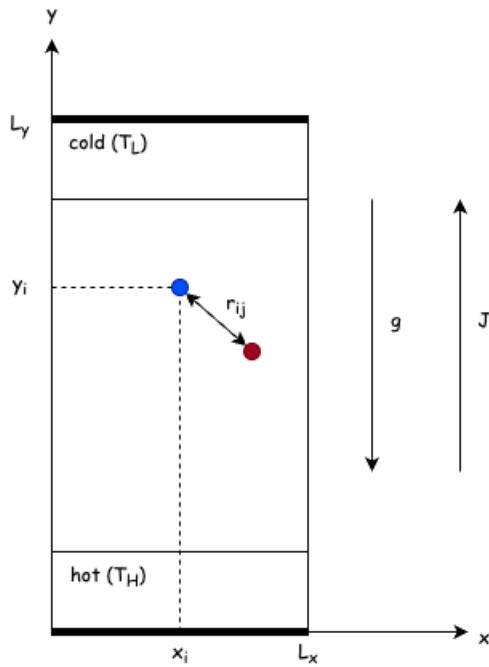
第 1 章

系の設定

この章では、本研究で扱う系の設定について説明する。

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 軸負の向きにかけて、熱流を y 軸正の向きに流す。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 热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 8σ となるように設定する。(図 1.1)

図 1.1: 系の概略図



1.1 ハミルトニアン

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \quad (1.1.0.1)$$

第 1 項から第 4 項まで順に, 運動エネルギー, 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル, 重力ポテンシャル, 壁-粒子間相互作用ポテンシャルである. 以降, 本節では自明な運動エネルギーと重力ポテンシャルの項は別として, 第 2 項の粒子-粒子間相互作用ポテンシャル, 第 4 項の壁-粒子間相互作用ポテンシャルについて説明する.

1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル

シミュレーションを行う際に, 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.

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

シミュレーション上では, 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

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

のように書き換えたポテンシャルを用いている.

1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約

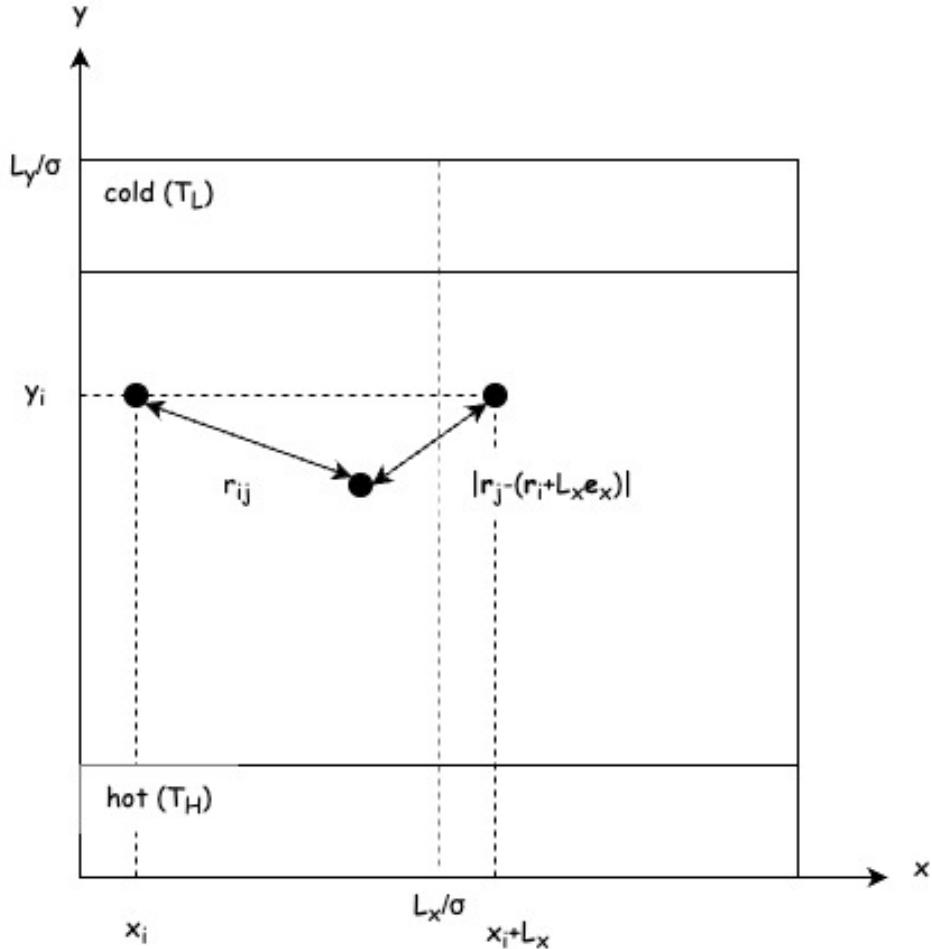
周期境界条件を考慮すると, 粒子-粒子間相互ポテンシャルの総計はまず以下のように書ける.[1]

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

$n_x = 0$ (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、粒子 j はイメージ粒子となるため、 $j = i$ の場合も含めることになる。このときにもダブルカウントがあるので、ポテンシャルを $1/2$ している。

図 1.2: オリジナルセルとイメージセル



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、

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

と、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、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課すと、粒子間の相互ポテンシャルの総計は先ほどよりも簡単に書けるようになる。

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

1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル

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

各パラメータは以下のように設定する.

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

カットオフ長とシフトアップを考慮して

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

この系では, $y = 0$ と $y = L_y$ に壁がついている. よって, 壁ポテンシャルは

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

のように書ける. これまでのことより, 系のハミルトニアンは式 (1.1.0.1) のように書き表せる.

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \quad (1.1.0.1)$$

1.2 熱流

系の両端に温度制御できるランジュバン熱浴を設計することによって, 熱流を実装することにする.

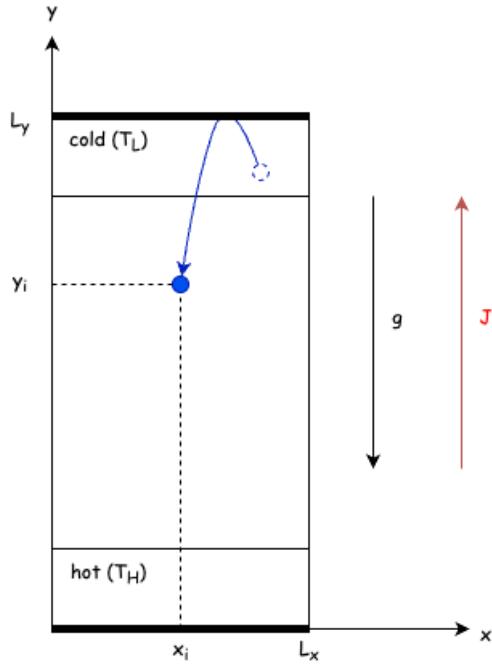


図 1.3: 热浴から飛び出る粒子の様子

粒子 i が热浴に侵入すると、その粒子の运动は以下のランジュバン方程式に従う.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \sqrt{2\gamma k_B T_\nu} \boldsymbol{\xi}_i(t)\end{aligned}\quad (1.2.0.1)$$

式 (1.2.0.1) の第 1 項は速度に比例する抵抗力、第 2 項はランダムな摇動力であり、 $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ は以下の条件を満たすホワイトノイズである.

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\xi}_i(t) &= (\xi_i^x(t), \xi_i^y(t), \xi_i^z(t)) \\ \langle \xi_i^a(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi_i^a(t) \xi_j^b(t') \rangle &= \delta_{i,j} \delta_{a,b} \delta(t - t')\end{aligned}$$

以下のように条件づけをしているので、粒子がそれぞれの热浴に侵入していないときには $\gamma = 0$ となり、正準方程式に従うようになっている.

$$\gamma(y_i) = 1. \quad T_\nu(y_i) = T_H. \quad (0 < y_i < 8\sigma)$$

$$\gamma(y_i) = 1. \quad T_\nu(y_i) = T_L. \quad (L_y - 8\sigma < y_i < L_y)$$

$$\gamma(y_i) = 0. \quad (8\sigma < y_i < L_y - 8\sigma)$$

第2章

実験の設定

この章では、行ったシミュレーションの設定についてそれぞれ説明をする。
系の上下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 χ として以下のように設定する。

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

壁の濡れ性を制御する無次元パラメータを 2 つ用意する。

R_t : 壁の厚み.

R_a : 引力幅.

これらを用いて、壁-粒子間相互作用の LJ ポテンシャルのパラメータ σ^{wall} と $r_{\text{cut}}^{\text{wall}}$ を以下のように書き表す。

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

パラメータ (R_t, R_a) を変えることによって、壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルが変化する。このときに、粒子集団の様相がどのように変わるのがみることが本論の主題である。

R_t と R_a を少しずつ変えた系でシミュレーションをして、粒子集団の様相の変化を見た。以下に示すのが、それらを動かす範囲である。

$$R_t : 0.0 \sim 0.5$$

$$R_a : 0.0 \sim 3.0 - 2^{1/6} = 1.877538\dots$$

数値実験上で実際に入力する値を以下に示す。本論では簡単のため小数点以下をいくらか簡略して示すことがある。

$$R_t = 0.0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5$$

$$R_a = 0.0, 0.4693845, 0.938769, 1.4081535, 1.877538$$

以下は R_t , R_a を変化させたときの LJ ポテンシャルがどのように変化するのかをそれぞれ可視化したグラフである。

参考のために、各パラメータの値を変えることによって、カットオフ長と衝突直径がどのように変わることかを示す。

$$R_a = 0.0 \Rightarrow r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 2^{1/6} \sigma^{\text{wall}}$$

$$R_a = 1.877 \Rightarrow r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0 \sigma^{\text{wall}}$$

$$R_t = 0.0 \Rightarrow \sigma^{\text{wall}} = 0.5\sigma$$

$$R_t = 0.5 \Rightarrow \sigma^{\text{wall}} = \sigma$$

である。

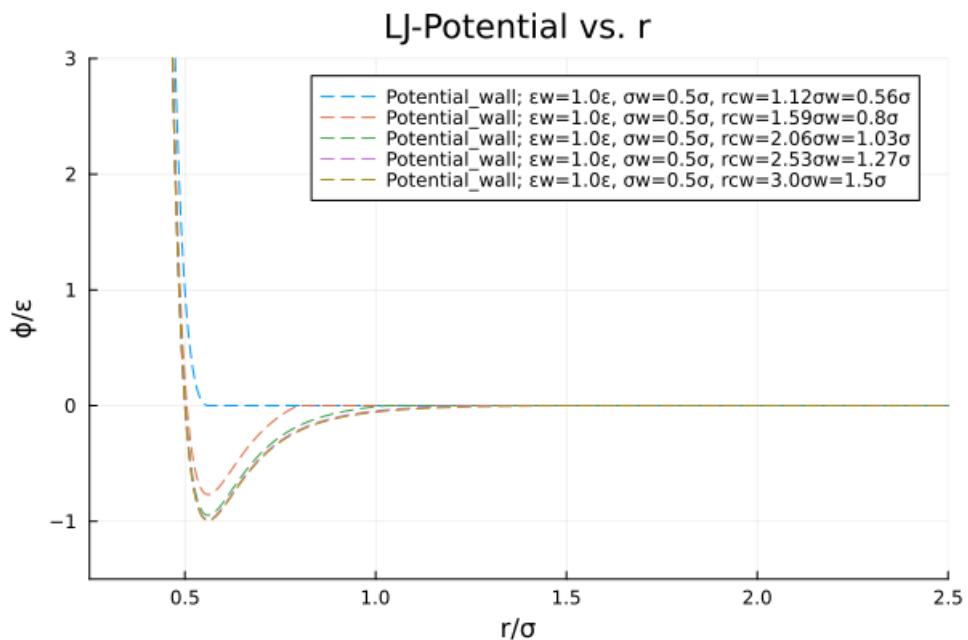


図 2.1: $R_t : 0.0$

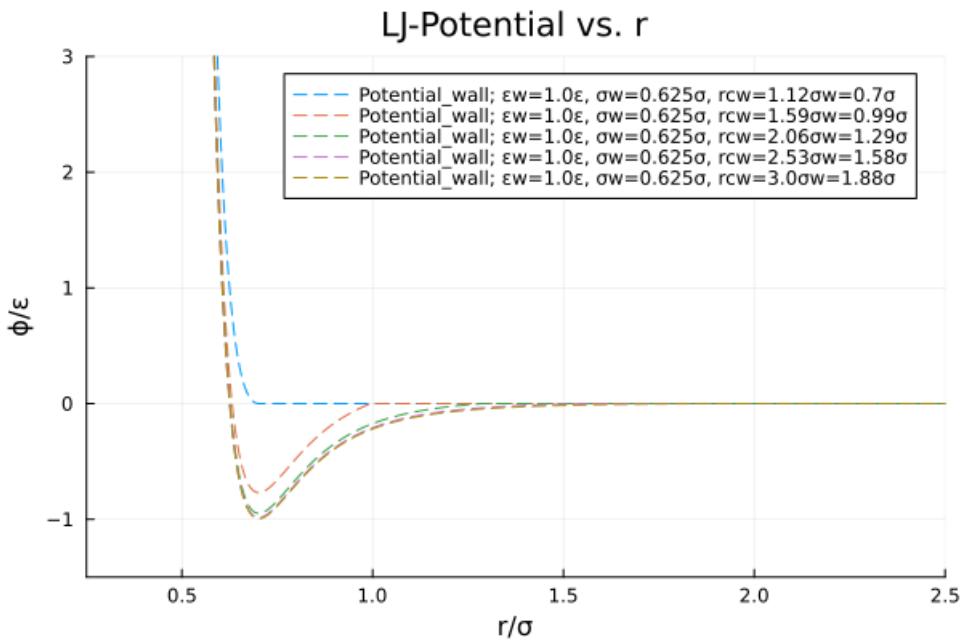


図 2.2: $R_t : 0.125$

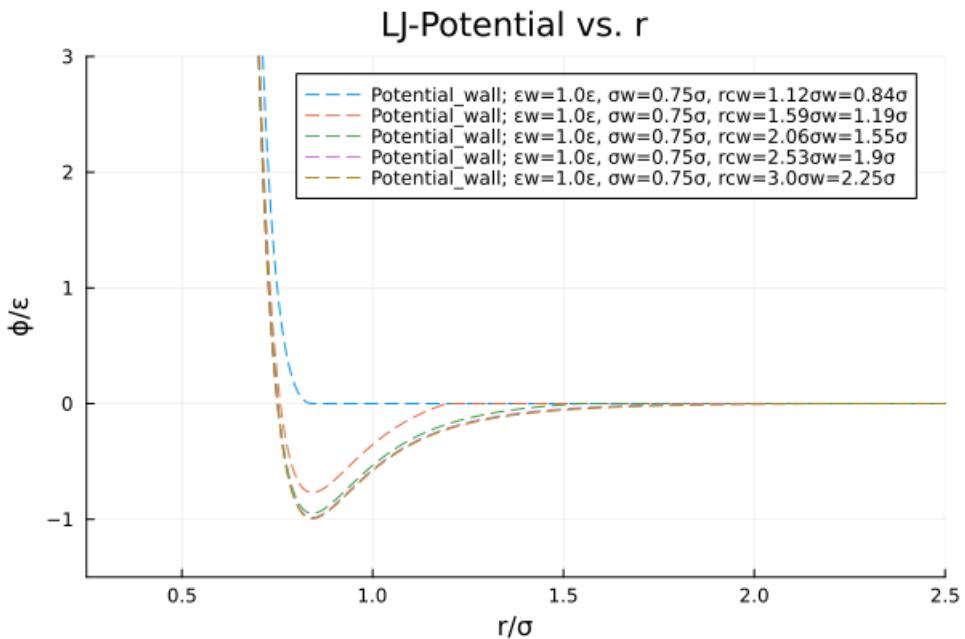


図 2.3: $R_t : 0.25$

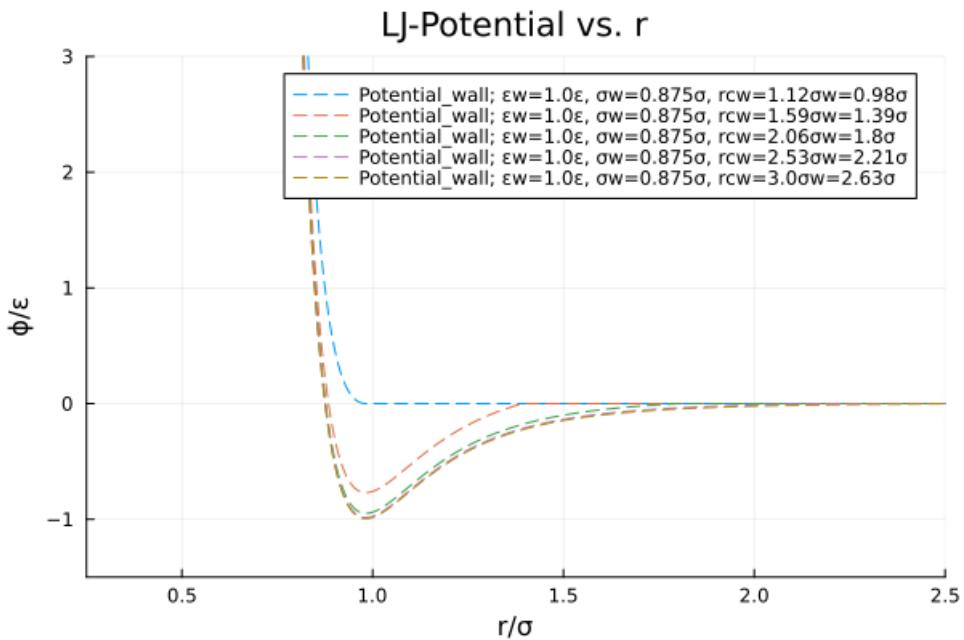


図 2.4: $R_t : 0.375$

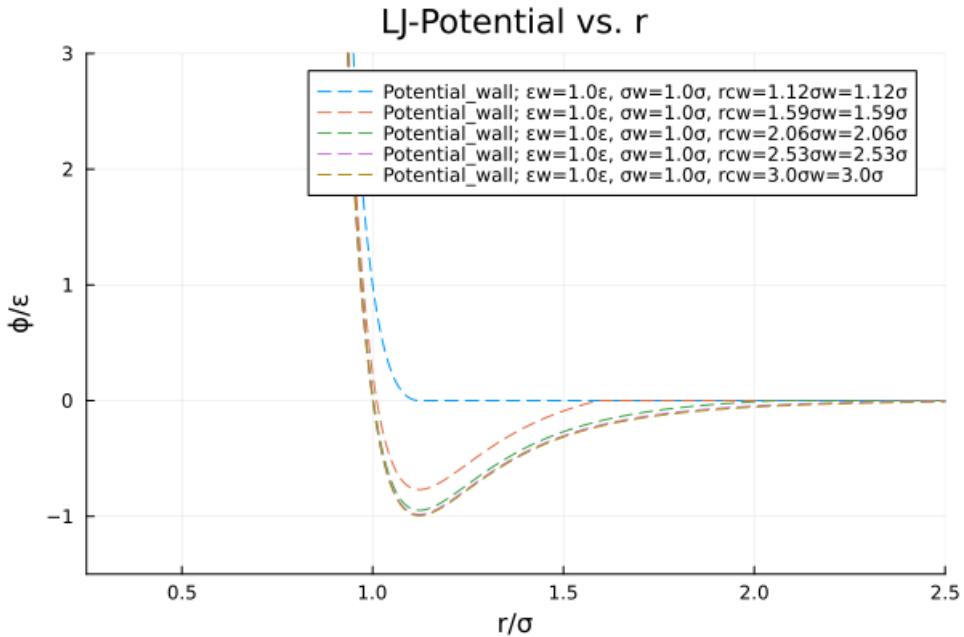


図 2.5: $R_t : 0.5$

本章の以降の実験は特記がない限り以下のパラメータで行うものとする.

- $N = 1250$: 粒子数
- $\rho\sigma^2 = 0.4$: 粒子数密度
- $L_x/\sigma = 39.528471 \simeq 39.5$: 系の x 幅
- $L_y/\sigma = 79.0569414 \simeq 79.0$: 系の y 幅

- $k_B T/\varepsilon = 0.43$: 初期温度
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$: 热浴の温度差
- $mg\sigma/\varepsilon = 0.0003999718779659611 \simeq 4.0 \times 10^{-4}$: 粒子にかかる重力の大きさ
- $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$: シミュレーションにおける時間刻み.

以下に記すのは、今後解析をする際に示すシミュレーションについての時間に関する説明である。

- t_i : シミュレーション開始時から、物理量を解析する際にデータを採用し始める時間。これ以降は定常状態であるとみなす。
- t_f : シミュレーション開始時から、シミュレーションの終了時までの時間。

図 2.8, 2.9, 2.10, 2.11, 2.12, 2.13 では重心位置の時間発展を示しているのだが、分析と考察で用いる t_i の時点がわかるように赤直線を引くことにしている。

いずれの実験の場合も $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0$ の時点では粒子は図 2.6 のように、規則正しく並べられている。

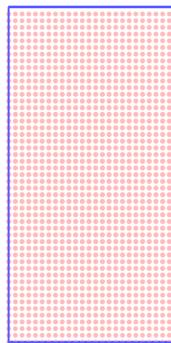


図 2.6: $N = 1250, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0$

2.1 重力と熱流を同時にかける

以下のように、 R_a と R_t を少しづつ変えた系を設定して、25 種類の系でそれぞれシミュレーションをした。

	R _a : 0.0	R _a : 0.4693	R _a : 0.9387	R _a : 1.408	R _a : 1.877
R _t : 0.0	a	b	c	d	e
R _t : 0.125	f	g	h	i	j
R _t : 0.25	k	l	m	n	o
R _t : 0.375	p	q	r	s	t
R _t : 0.5	u	v	w	x	y

パラメータを確認する.

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

この際の粒子集団の様相は以下のようである.

リンク先の動画は $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに描画している.

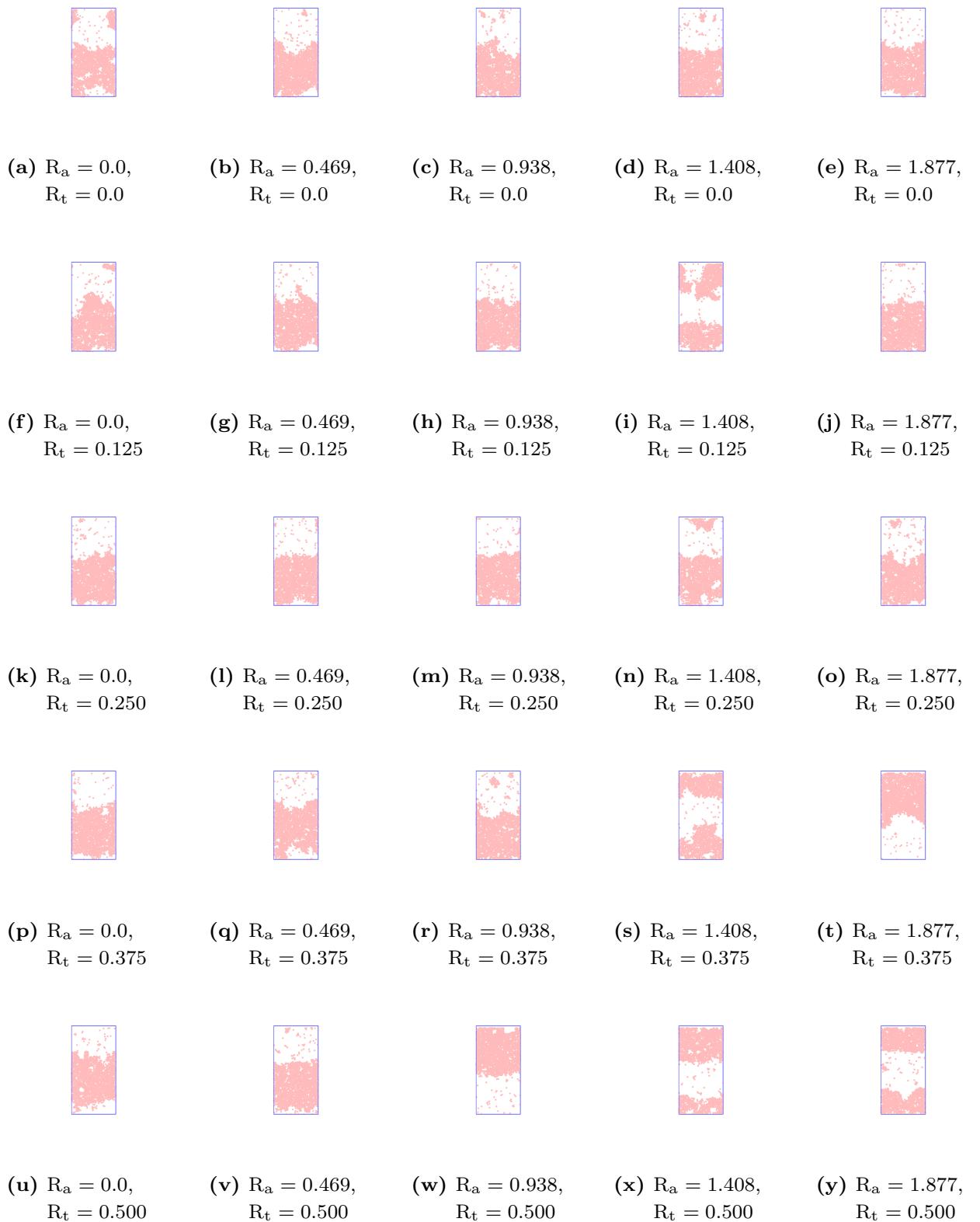


図 2.7

重心位置 Y_g を、系の y 幅を用いて $0 \sim 1$ にスケーリングして、時系列プロット

する。

$$Y_g \equiv \bar{y}_i = \frac{1}{N} \sum_i^N y_i$$

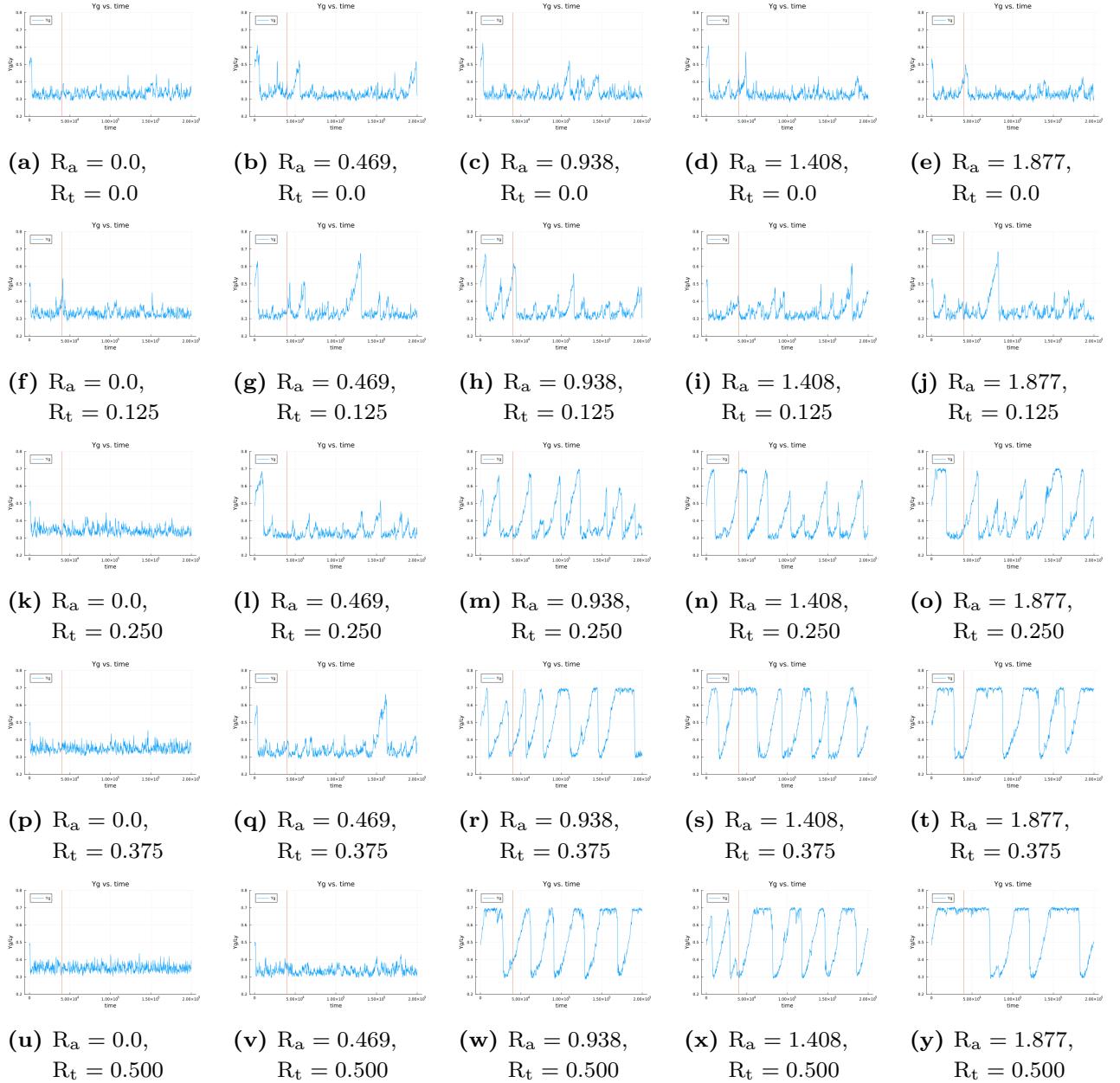


図 2.8: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

まず重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかけると同時に測定を開始する。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 79.0$
- $L_y/\sigma \simeq 158.1$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$
- $t_f' \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

続いて重力をかけた緩和後の系で、温度差のある熱浴をそれぞれ改めて以下のようにつけ、熱流をかけてシミュレーションをする。

- $\chi = k_B \Delta T / mgL_y = 1.265$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^5$

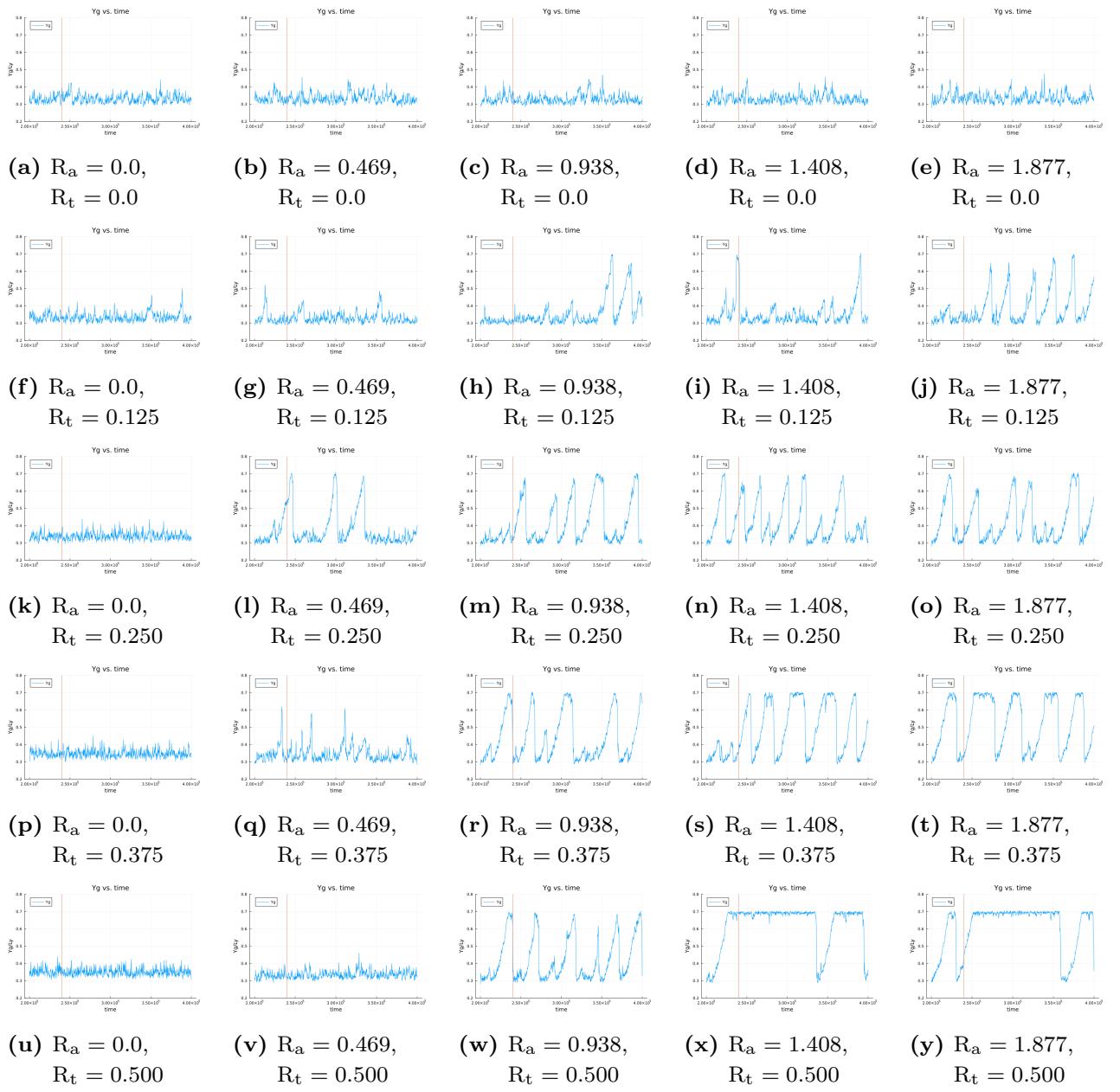


図 2.9: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 4.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.3 重力のみをかける

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$

- $k_B \Delta T / \varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma / \varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon / m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

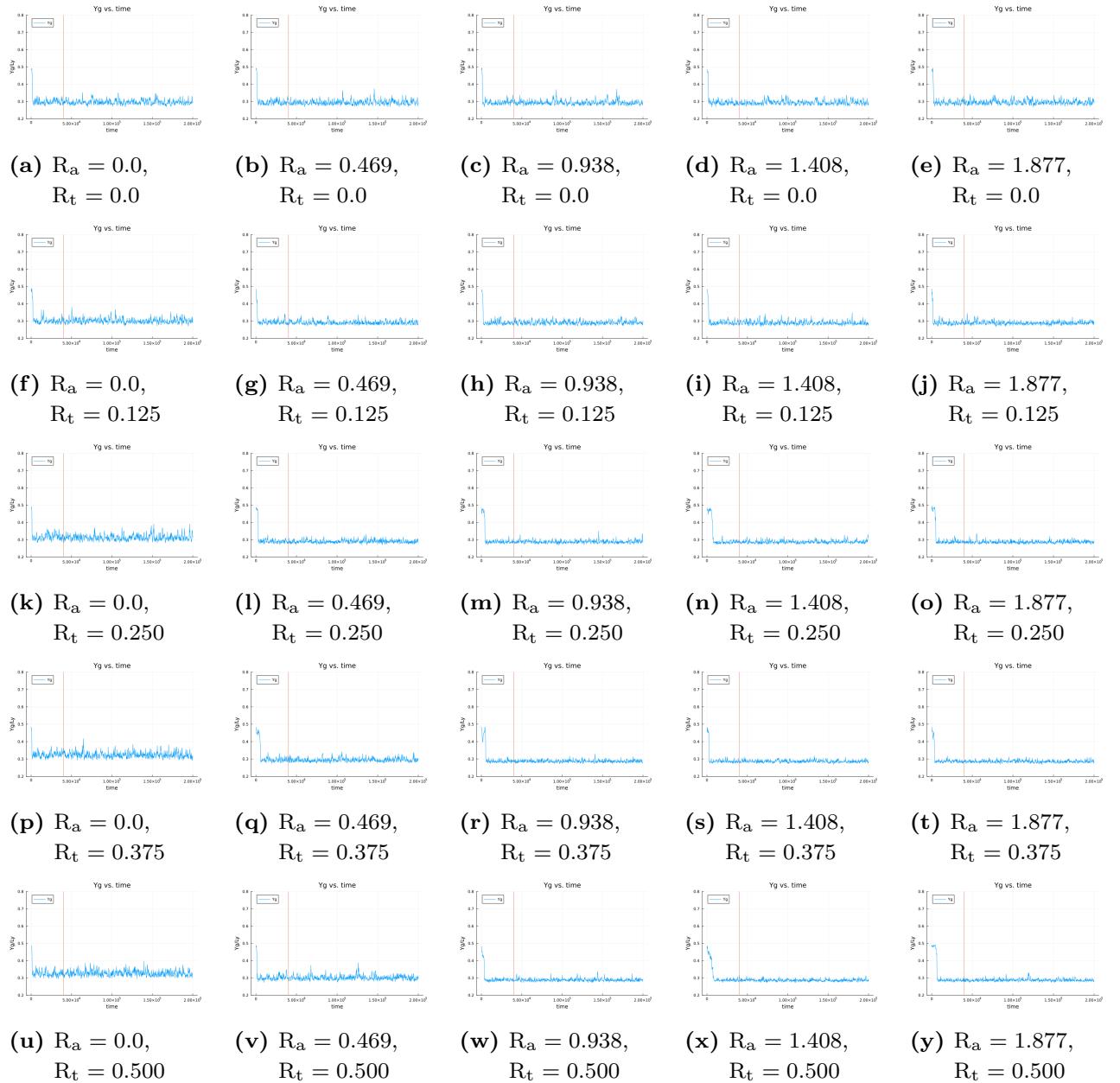


図 2.10: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt \sqrt{\varepsilon / m\sigma^2} = 0.005, t \sqrt{\varepsilon / m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット .

2.4 熱流のみをかける

- $N = 1250$

- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon = 0.0$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

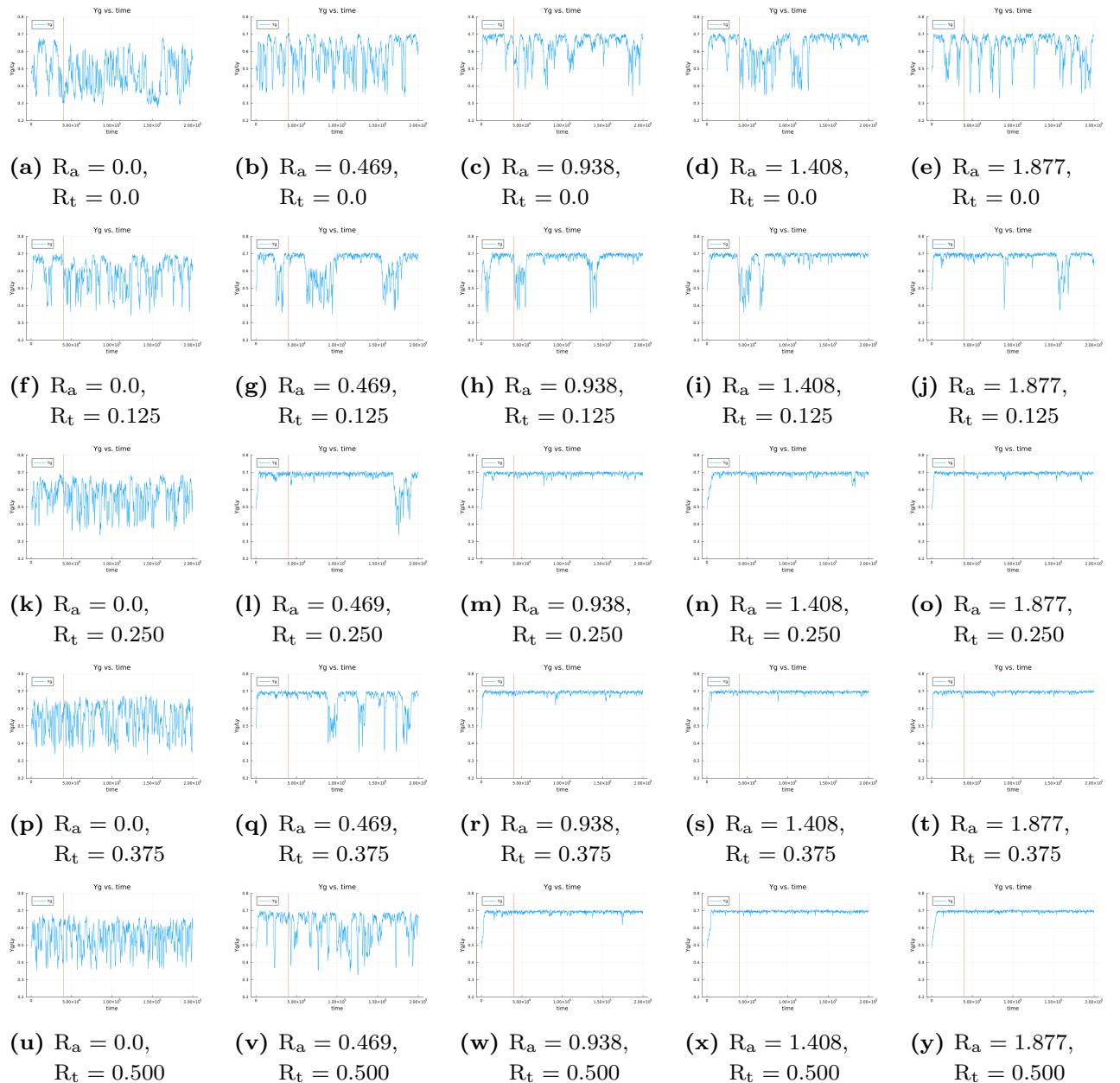


図 2.11: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.5 重力と熱流を同時にかける (時間 10 倍)

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_{\text{B}}T/\varepsilon = 0.43$
- $k_{\text{B}}\Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^6$

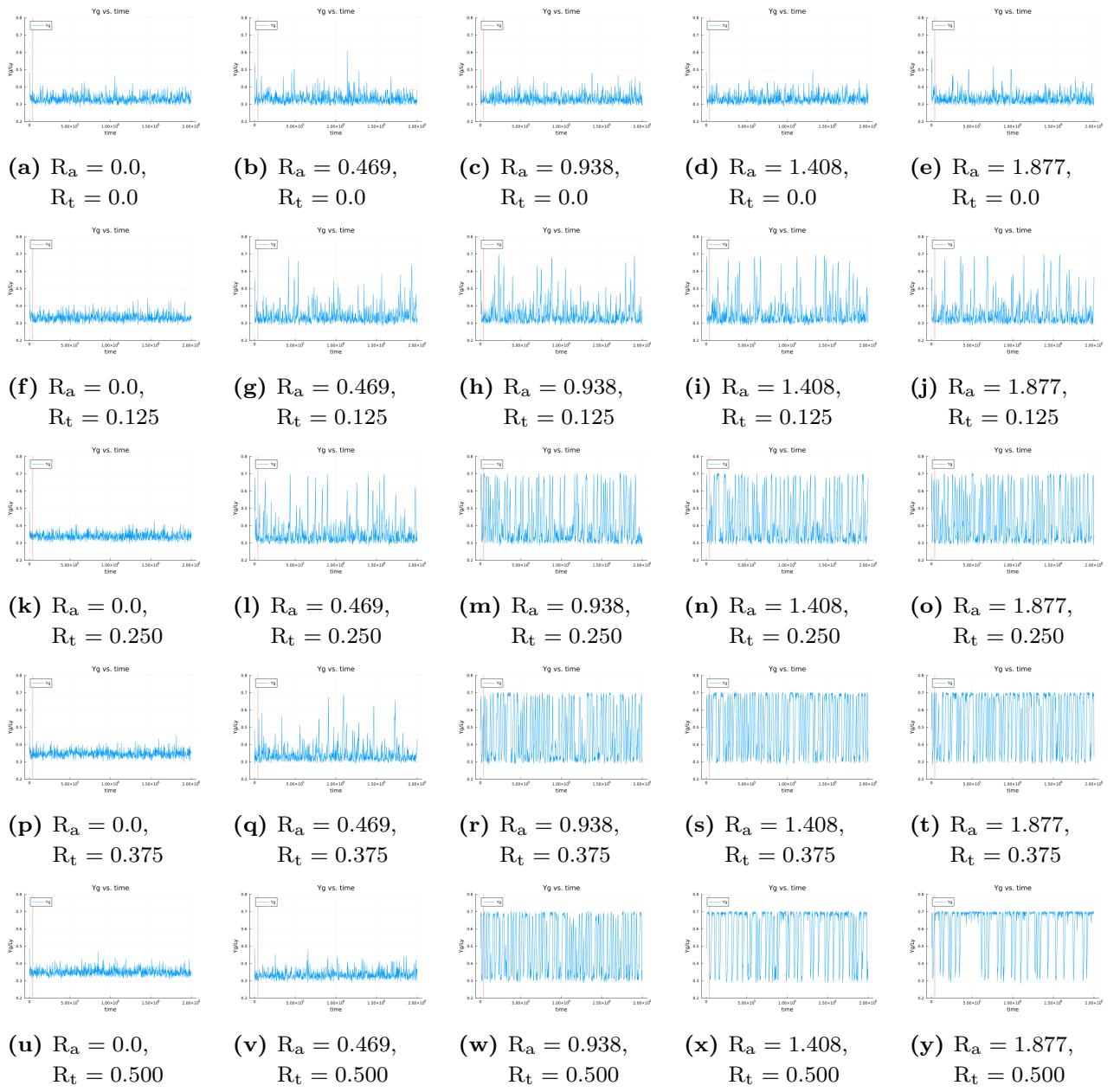


図 2.12: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^6$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

2.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）

先ほどと同様に重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかけると同時に測定を開始する。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq$

- $L_y/\sigma \simeq$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$
- $t_f' \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

続いて重力をかけた緩和後の系で、温度差のある熱浴をそれぞれ改めて以下のようにつけ、熱流をかけてシミュレーションをする。

- $\chi = k_B \Delta T / mg L_y = 1.265$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.2 \times 10^6$

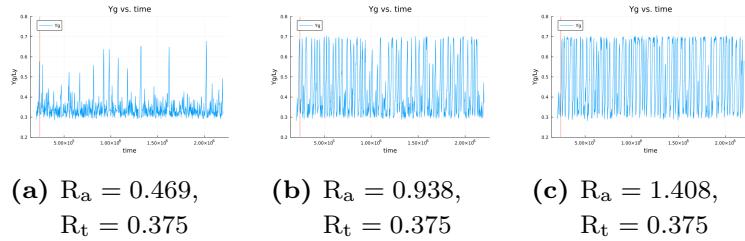


図 2.13: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 2.2 \times 10^6, t \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット。

第 3 章

分析と考察

この章では、第 2 章において行ったシミュレーションを用いて、それぞれ分析と考察をしていく。適宜文脈に則した分析画像を提示するが、入りきらない部分は付録 B に収録する。

以降の解析は定常状態であるとみなす、 $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^4$ からのデータを用いてプロットすることにしている。

3.1 重心位置

重心位置の標準偏差は以下のように書くことができる。

$$\sigma(Y_g) = \sqrt{\frac{1}{N_D} \sum_{t=t_i}^{t=t_f} (Y_g(t) - \bar{Y}_g)^2}$$

これは、時間発展する重心位置のばらつき具合を意味する。後述する空間的なばらつきとは定義から見ても分かるとおり異なる量である。

重心位置の標準偏差についてそれぞれ横軸を変えて同時プロットで表してみる。

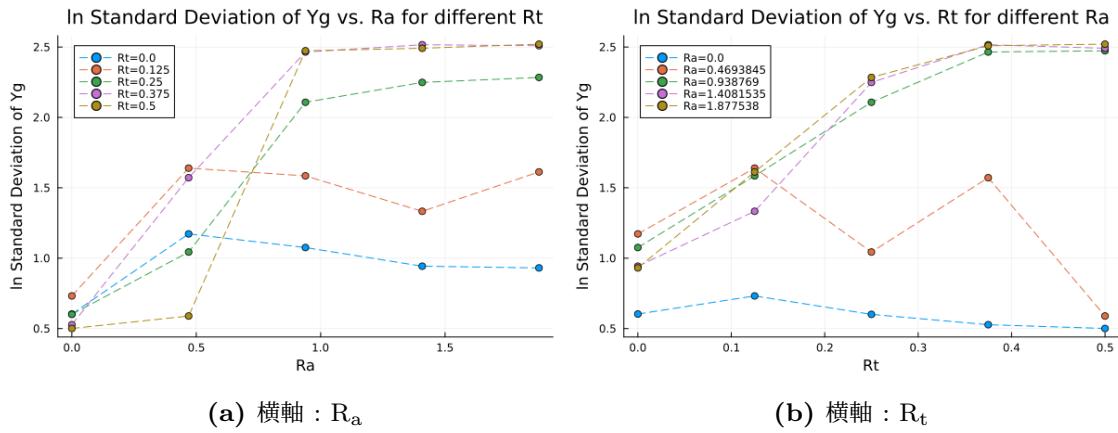


図 3.1: 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

図 2.8v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と 図 2.8w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間をより詳しく見る。

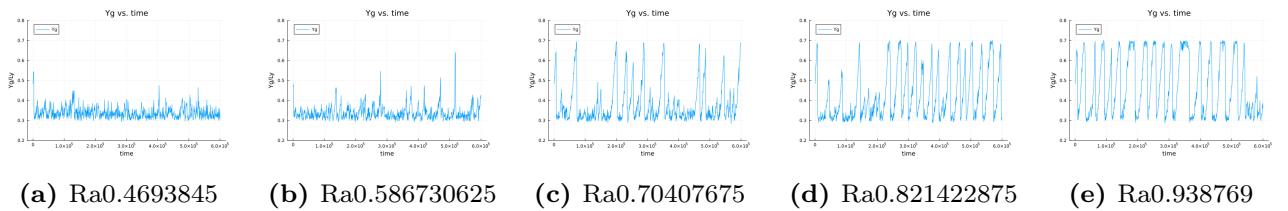


図 3.2: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^5, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 600$ ごとにプロット。

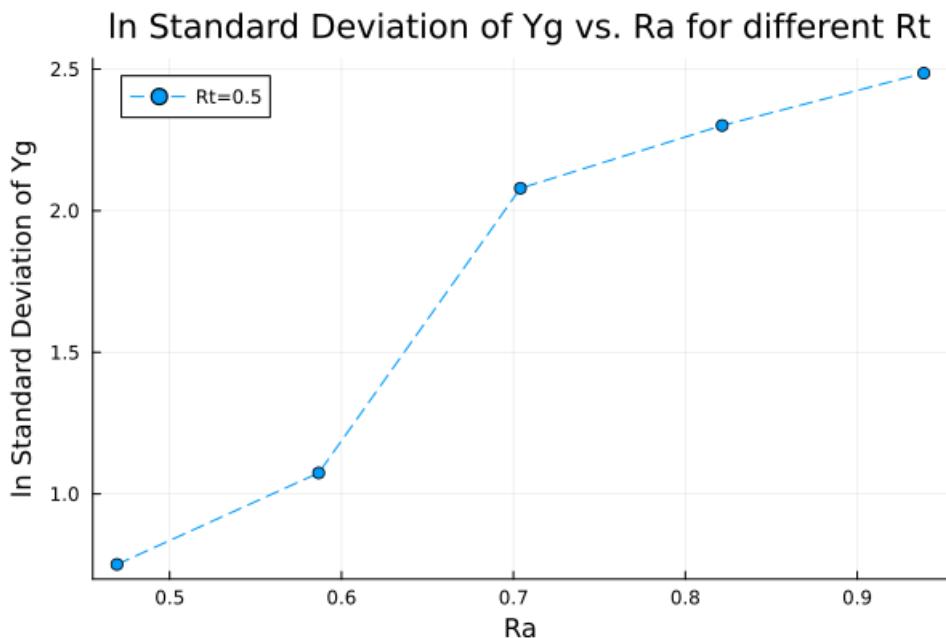


図 3.3: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

図 3.2c $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 3.2e $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間を詳しく見る.

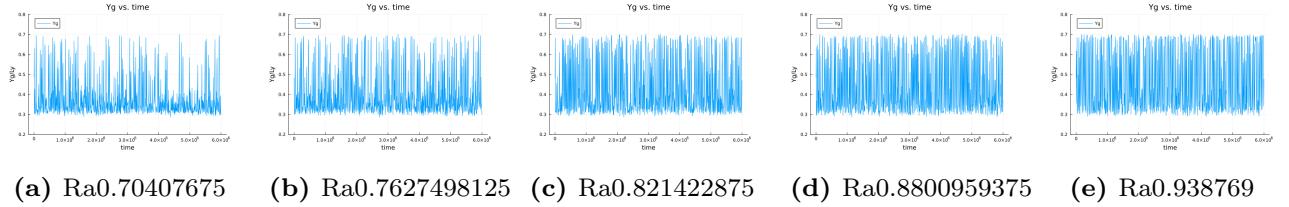


図 3.4: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 6000$ ごとにプロット.

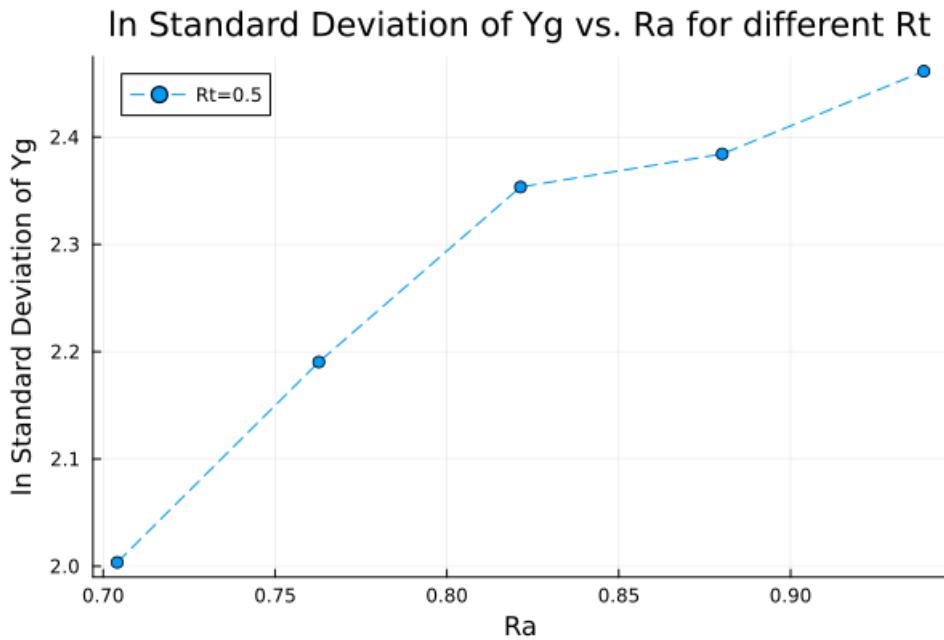


図 3.5: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

先の分析では、時間プロットの幅が大きい可能性があるため、図 2.8v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 2.8w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間のプロット幅を小さくしたデータを使う。その際、簡単のため、 $R_a = 0.5 \sim 1.0$ の間を見るることにする。

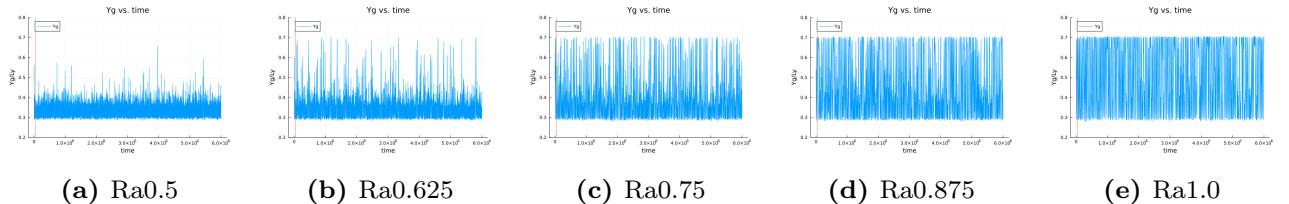


図 3.6: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 50$ ごとにプロット.

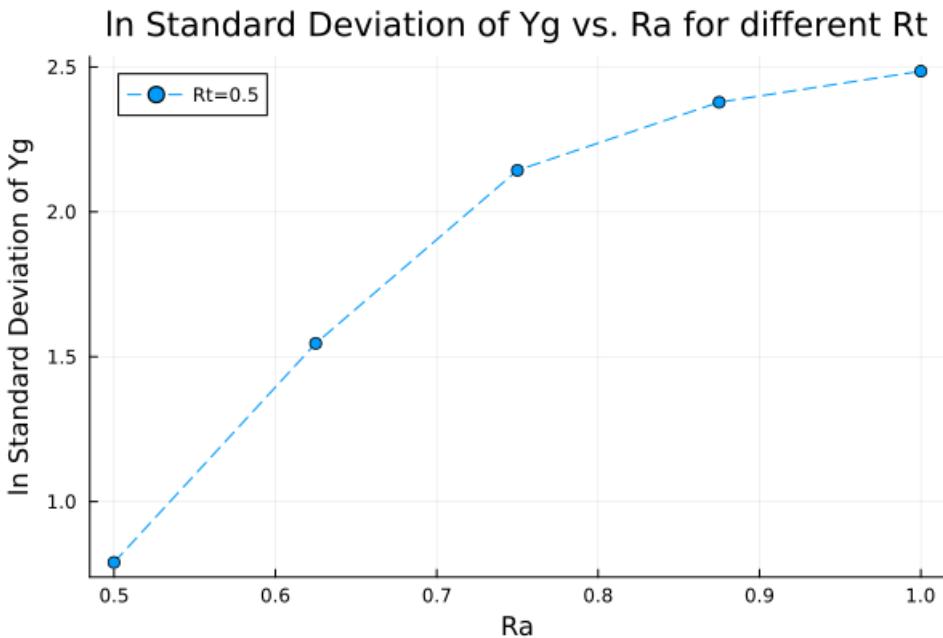


図 3.7: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

図 3.7 からも見て分かるように, $R_t = 0.5$ において, R_a の値を大きくするほど, 各系の重心位置の時間発展はばらつきが小さくなると言うことがわかる.

3.2 定常過程

3.3 リミットサイクル

周期的なダイナミクスが見える系について考える. 非線形振動にはリミットサイクル振動 [2] と呼ばれる振動の形態があり, ここでは流体系の重心位置と空間的なばらつきの相空間での軌道をみることにする.

流体系の空間的なばらつき $\sigma_y(t)$ は以下のように定義する.

$$\begin{aligned}\sigma_y(t) &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - \bar{y}_i(t))^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t)^2 - Y_g(t)^2}\end{aligned}$$

以下のように並べると, 壁の濡れ性を強くするとサイクルが閉じ, このとき非定常

で周期的なダイナミクスが現れているということがわかる。

画像

また、このリミットサイクルからは、周期的なダイナミクスが見れる系においては流体系が液滴を形成しつつ、上壁に吸着しきるまでのスピードが、液体の落下のスピードよりも遅いことが分かる。

リミットサイクルのプロットが多く密集している箇所が濃くなるようにヒートマップを作ると以下のように、流体系がある位置に長く留まることが分かりやすくなる。

画像

第4章

まとめ

4.1 壁の濡れ性と周期的なダイナミクス

壁が濡れるほど周期的なダイナミクスははっきりと現れる。

謝辞

本論の執筆, もとい発表や研究の進行には, 指導教官の中川尚子先生をはじめ, 同研究室のD3である吉田さん, 同輩の金澤くん, 仲村くん, 平尾くん, 同グループの先輩方,多くの皆様にご協力をいただきました.

中川先生には, 院進するか就職するかの選択をする際にも, 親身に接していただき, さらにゼミでも研究のご指導をいただきまして, 大変お世話になりました.

吉田さんは, 本人が卒業するタイミングで非常に忙しい中にも関わらず, 研究の相談に乗ってくださいり, 稚拙な質問にも優しく丁寧に答えていただきました. このような心に余裕のある先輩になりたいと, 私の目標でした. たいへんありがとうございました.

物性理論グループ同輩の皆さまとは, 一緒にご飯を食べたり, 夜遅くまで議論をしたりと非常に濃い時間を過ごしてきました. 9人と他の研究室に比べて, 多めの人数ではありましたが, 卒業研究のプレゼン前には皆で集まって発表練習をしながら, 資料を練るなど, なかなか横のつながりが強かったのではないかと感じております. 進路はさまざまになりますが, 皆さんのご活躍を心より願っております.

最後に, 学生生活を支えていただきました私の家族に感謝申し上げまして, 私の謝辞といたします.

付録 A

研究手法

A.1 LAMMPS

はじめての LAMMPS からインストール.

A.2 Lennard-Jones potential

付録 B

分析画像

本論の構成上入りきらなかった分析画像をここに記す.

B.1 ヒストグラム

B.1.1 重力と熱流を同時にかける

図 2.8 の結果をそれぞれ正規化したヒストグラムにして表す.

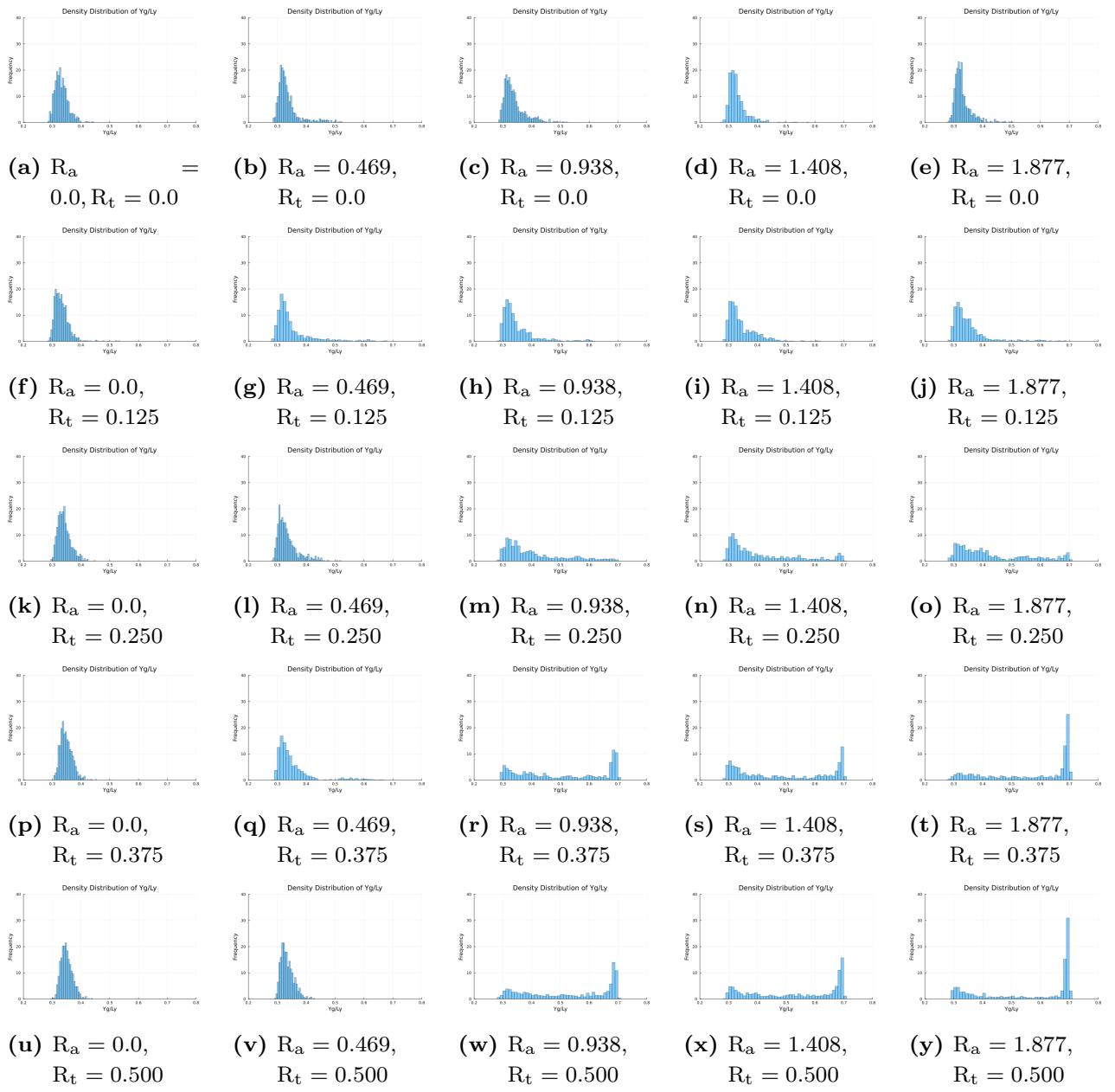


図 B.1: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに Y_g をプロットしたもののヒストグラム. ビン数は共通で 50 本.

B.1.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

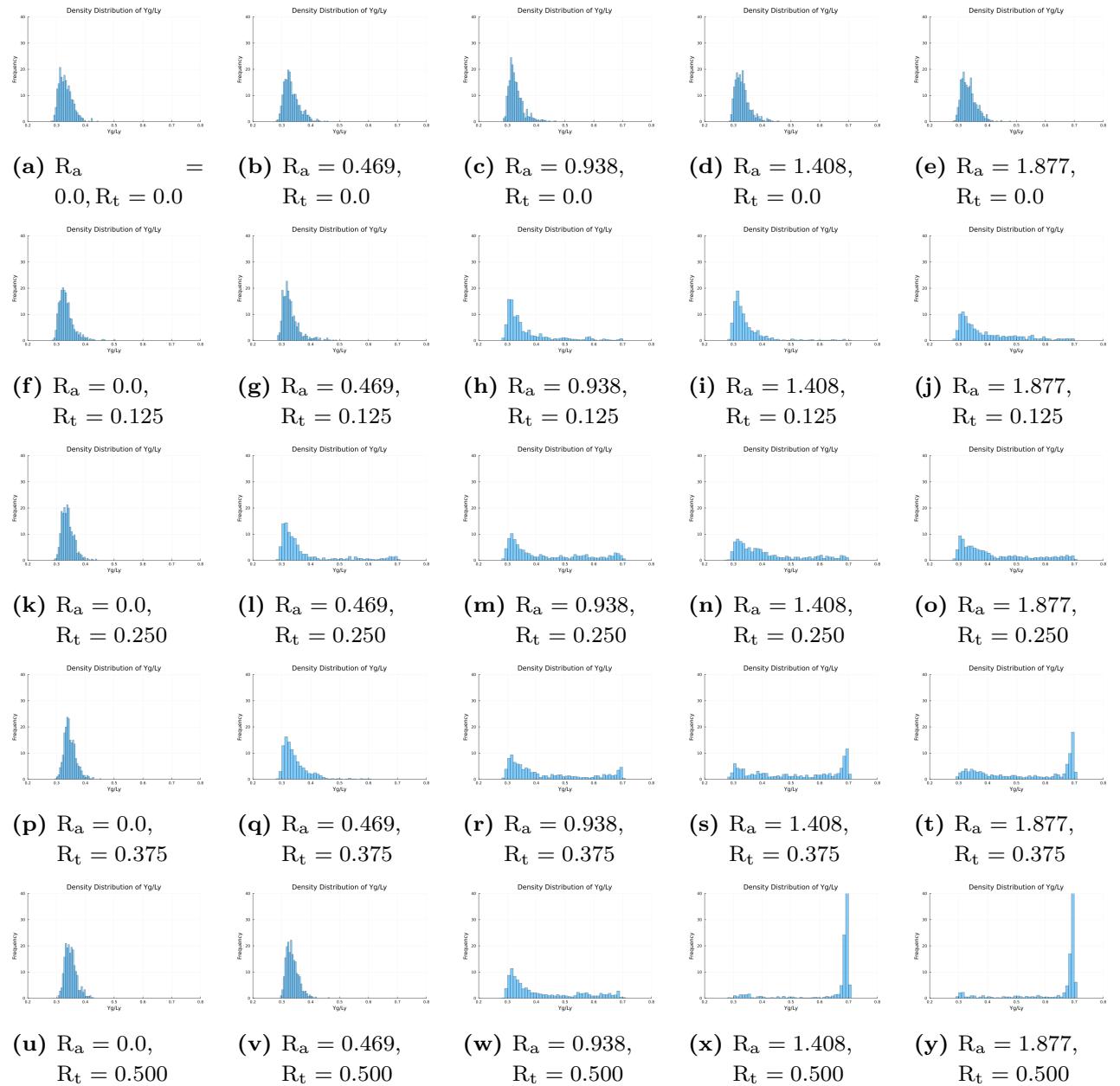


図 B.2: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

B.1.3 重力のみをかける

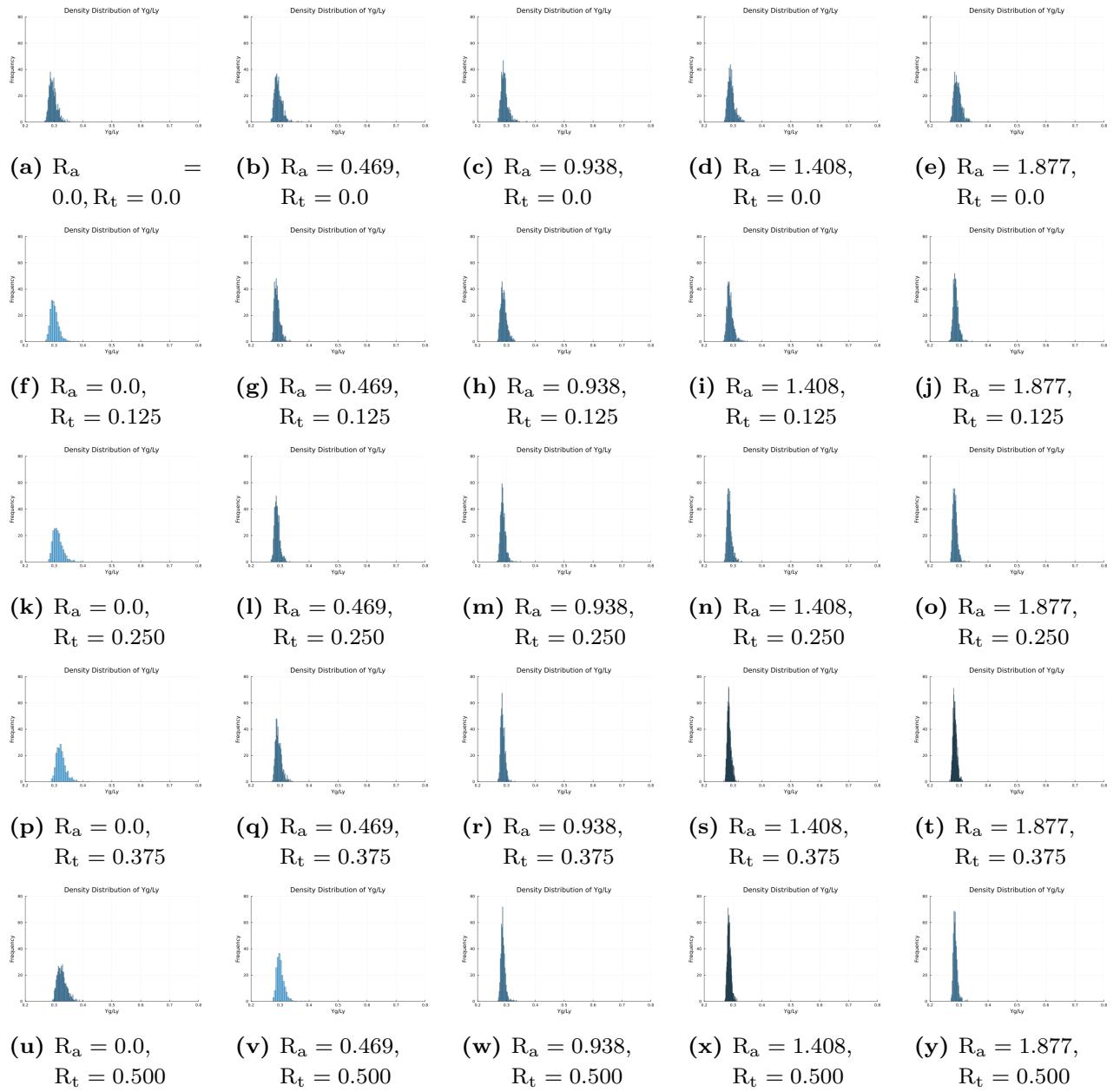


図 B.3: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.1.4 热流のみをかける

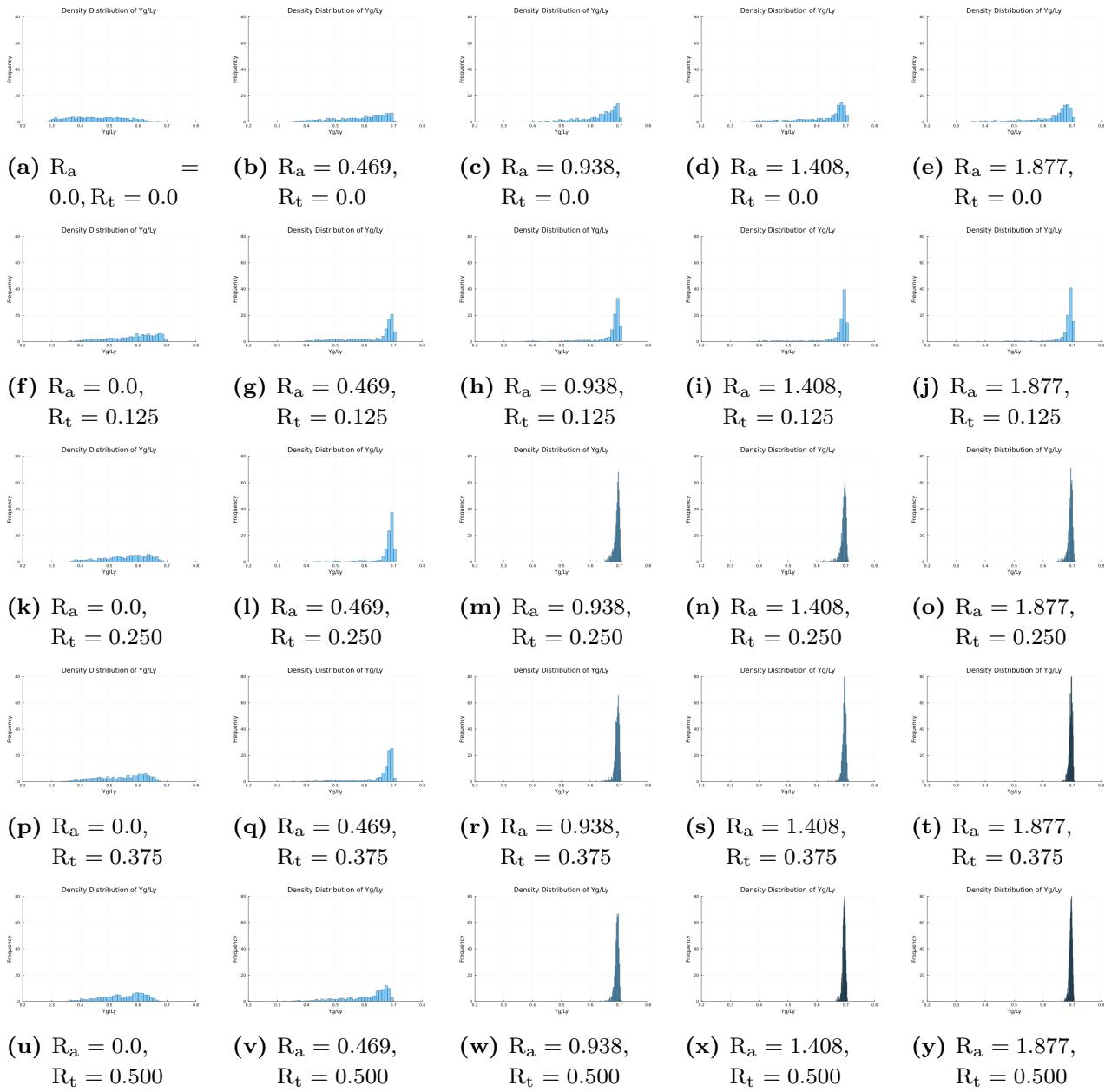


図 B.4: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.1.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

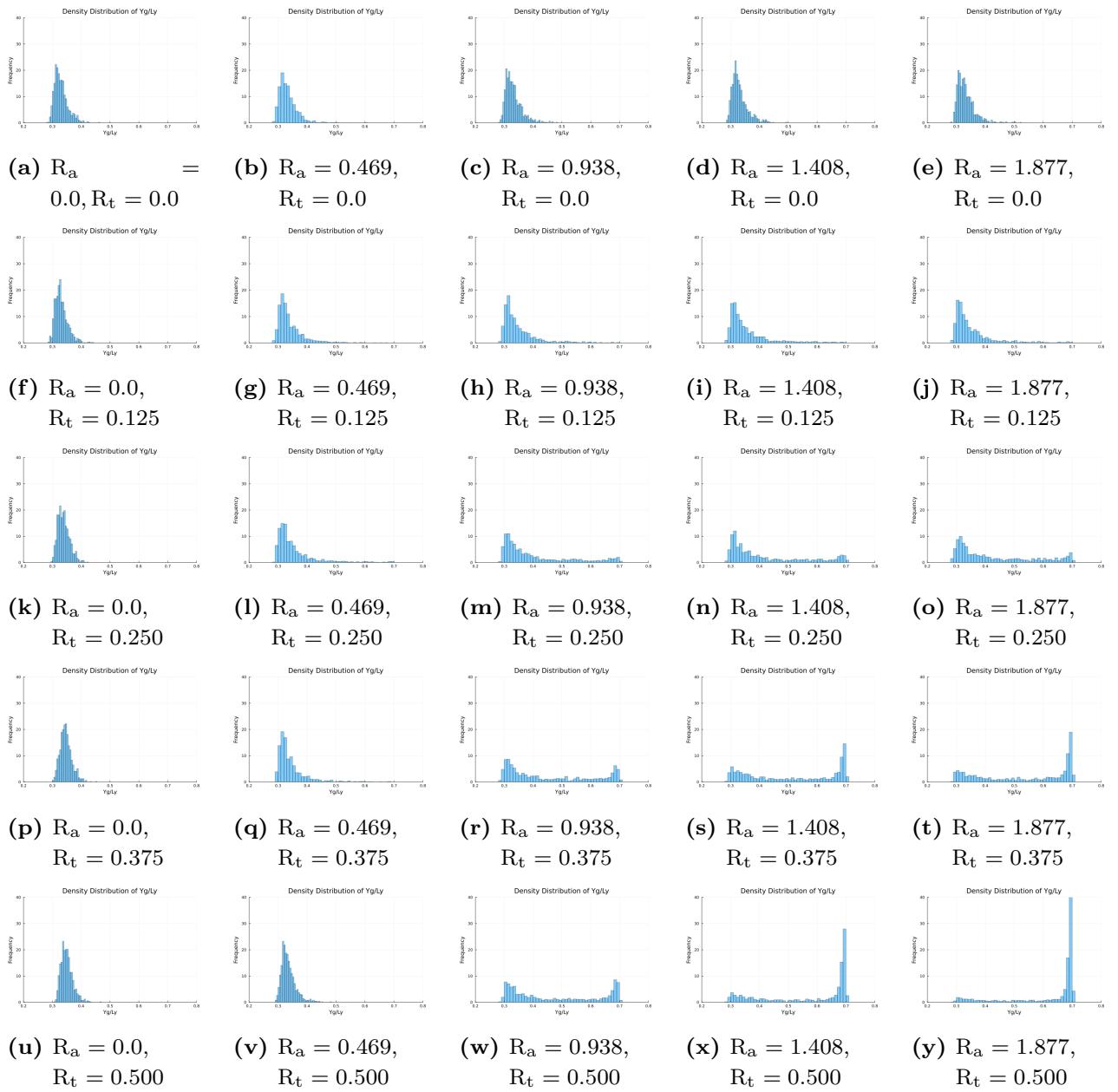


図 B.5: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.1.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

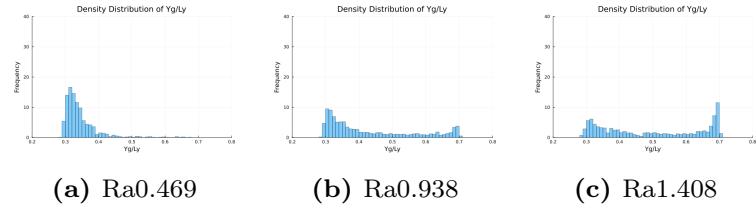


図 B.6: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.2 空間的な揺らぎ

粒子集団のばらつき具合、空間的な揺らぎを時系列で考える。

$$\begin{aligned}
 \sigma_y(t) &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - \bar{y}_i(t))^2} \\
 &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2} \\
 &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t)^2 - Y_g(t)^2}
 \end{aligned}$$

B.2.1 重力と熱流を同時にかける

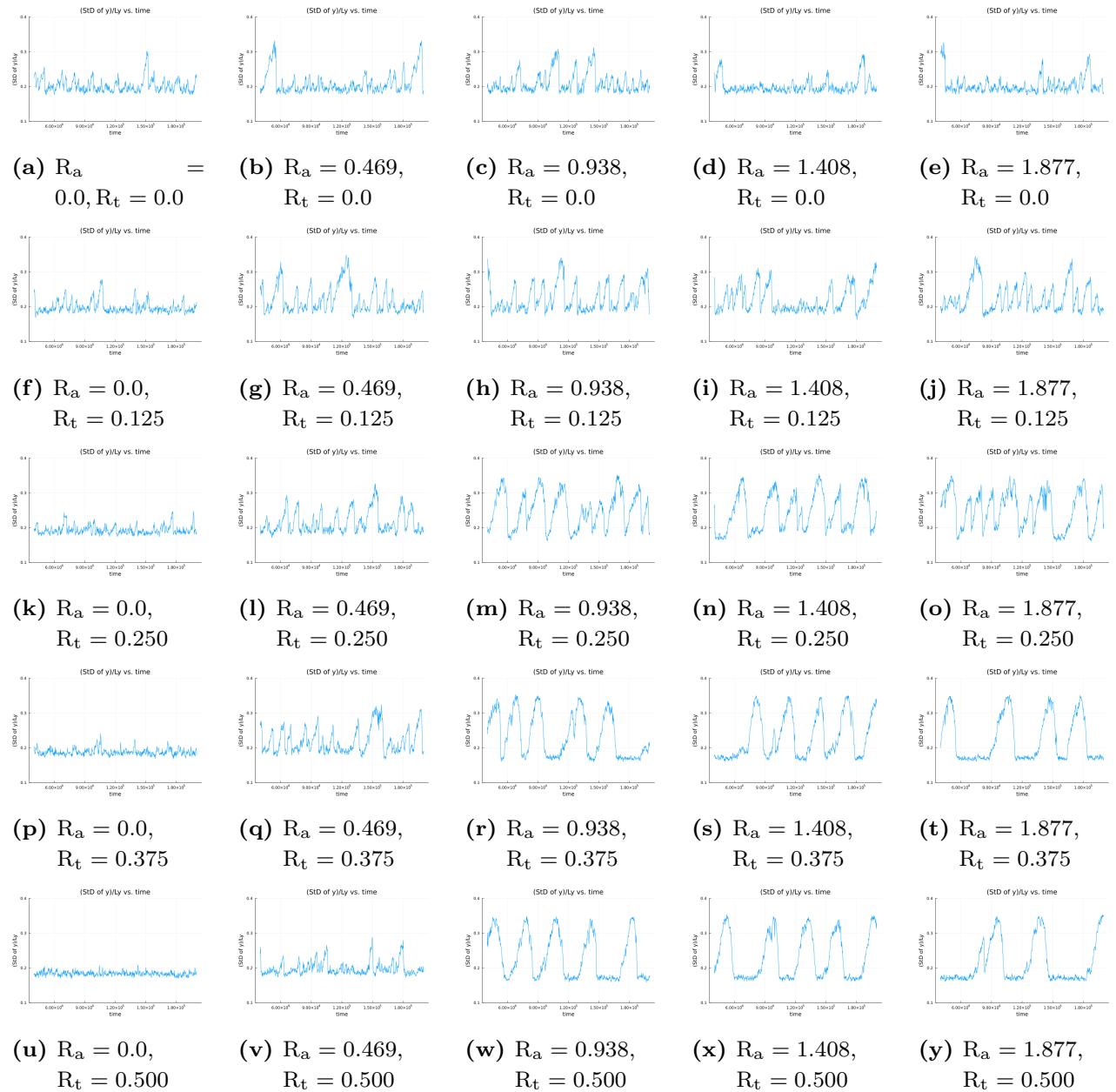


図 B.7: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット。

B.2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

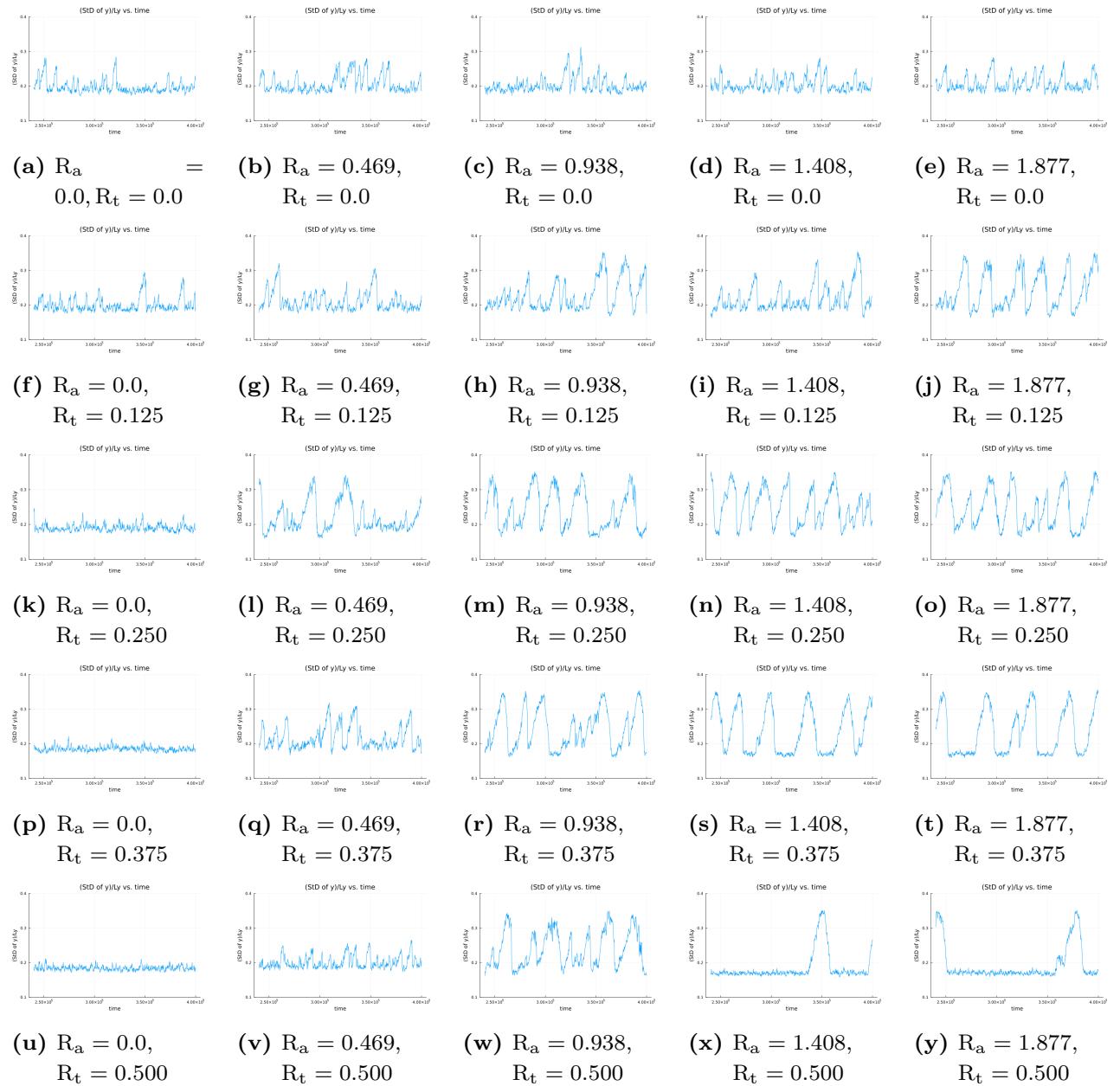


図 B.8: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット。

B.2.3 重力のみをかける

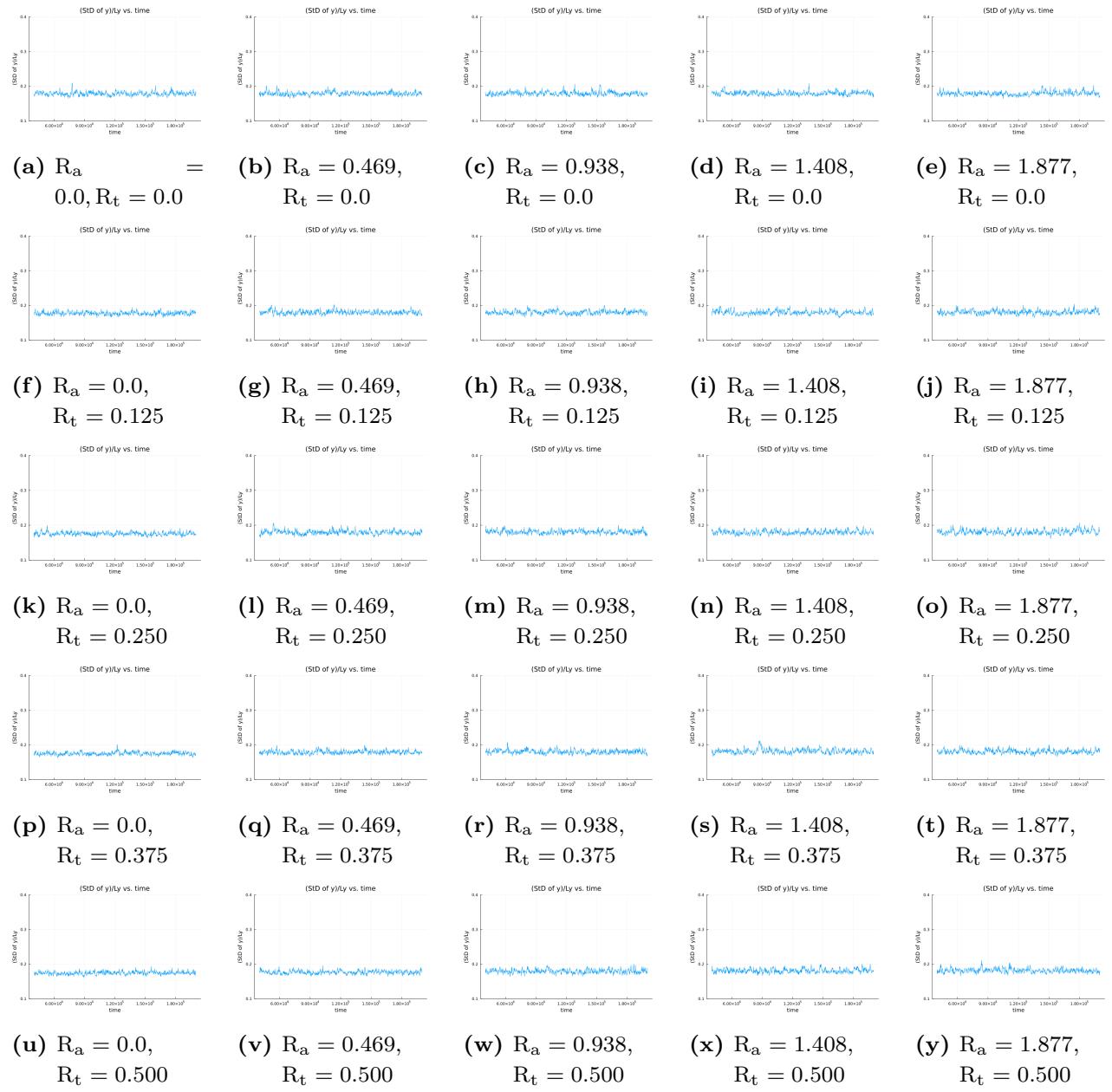


図 B.9: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.2.4 熱流のみをかける

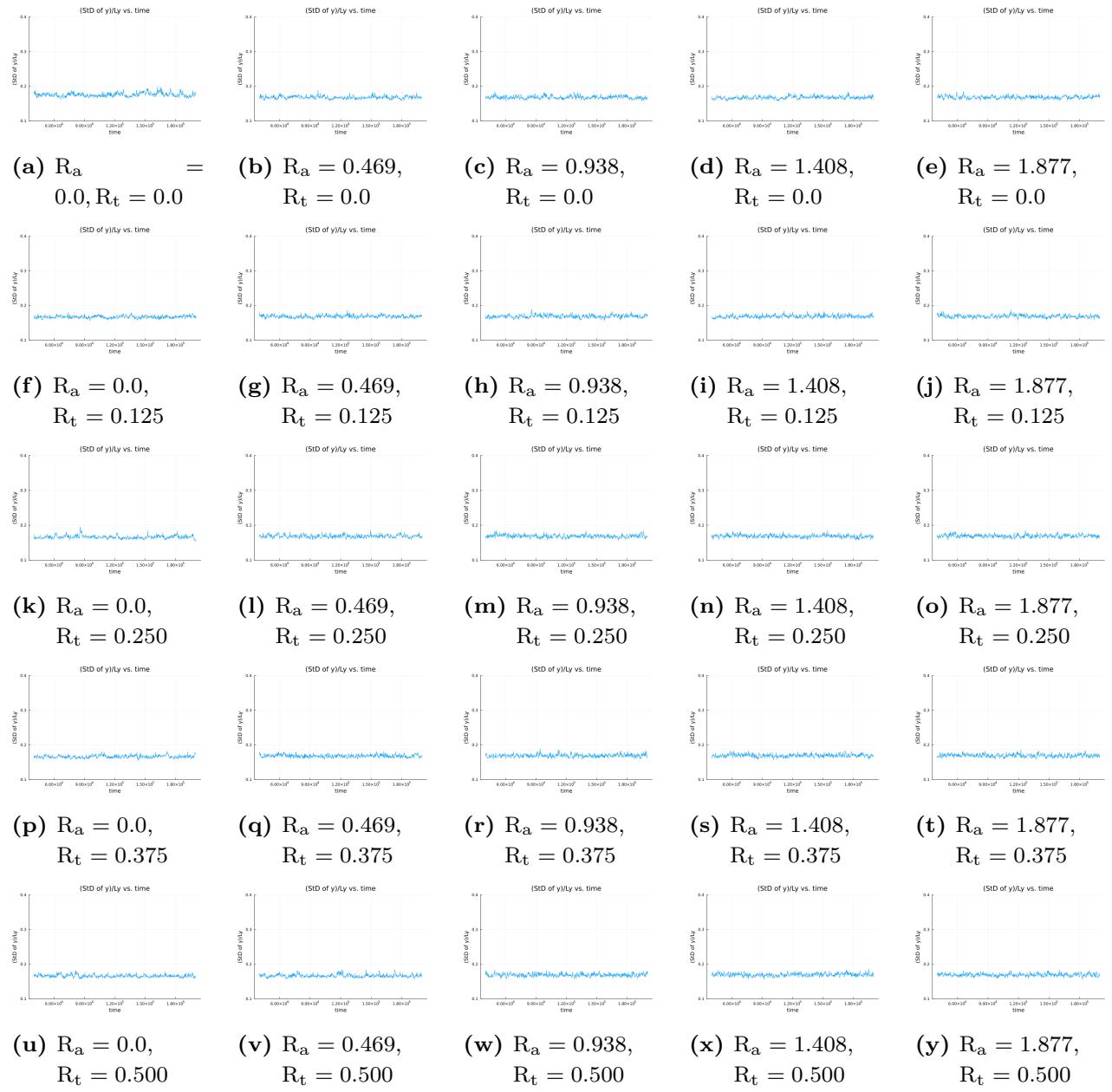


図 B.10: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.2.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

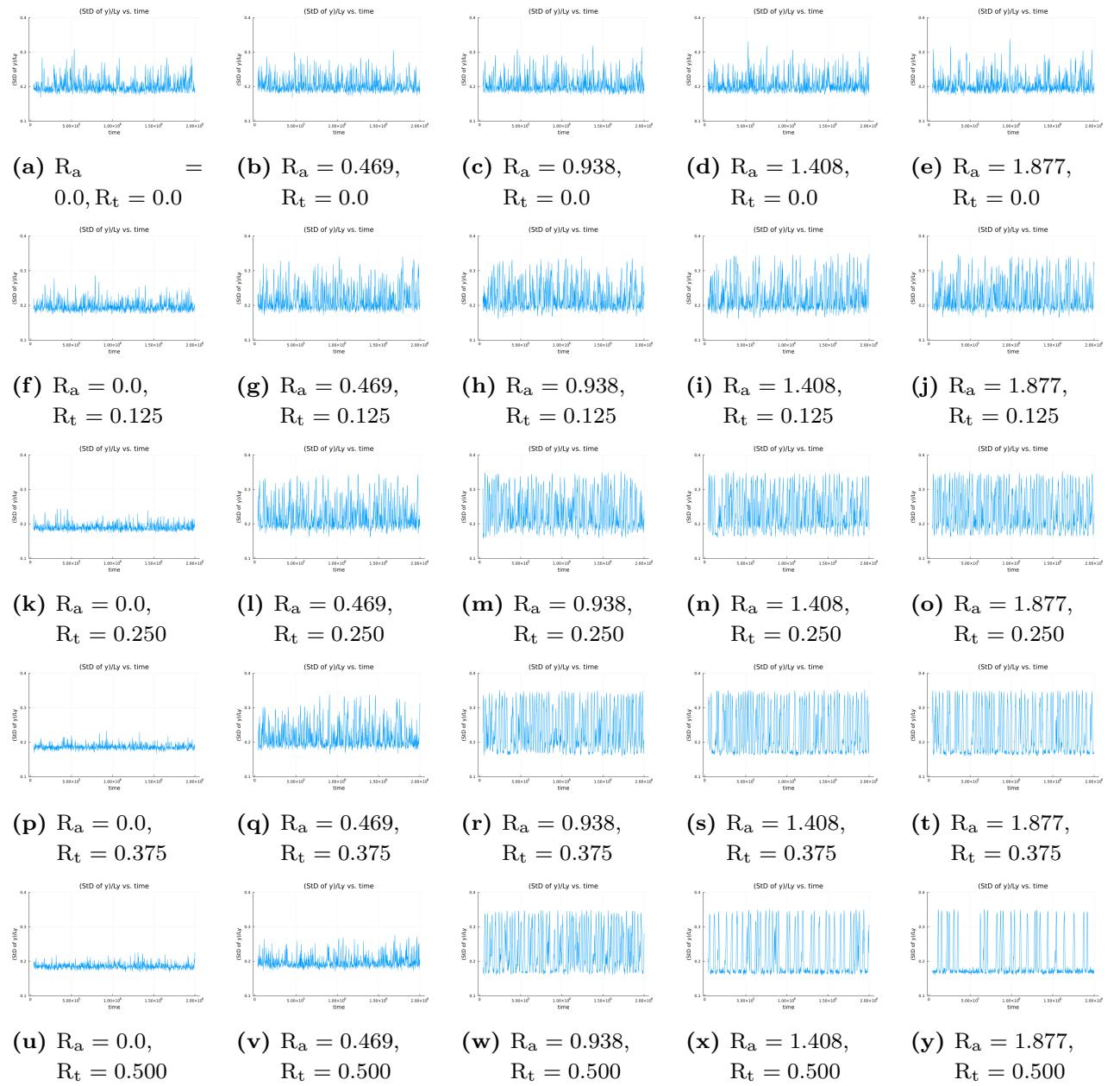


図 B.11: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.2.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

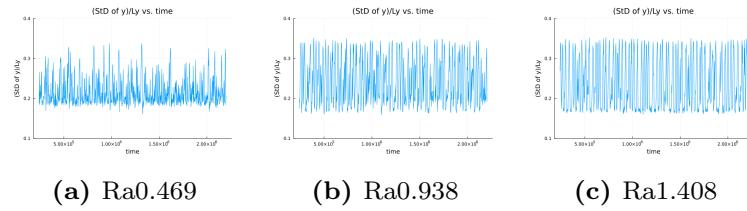


図 B.12: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.3 サイクル

B.3.1 重力と熱流を同時にかける

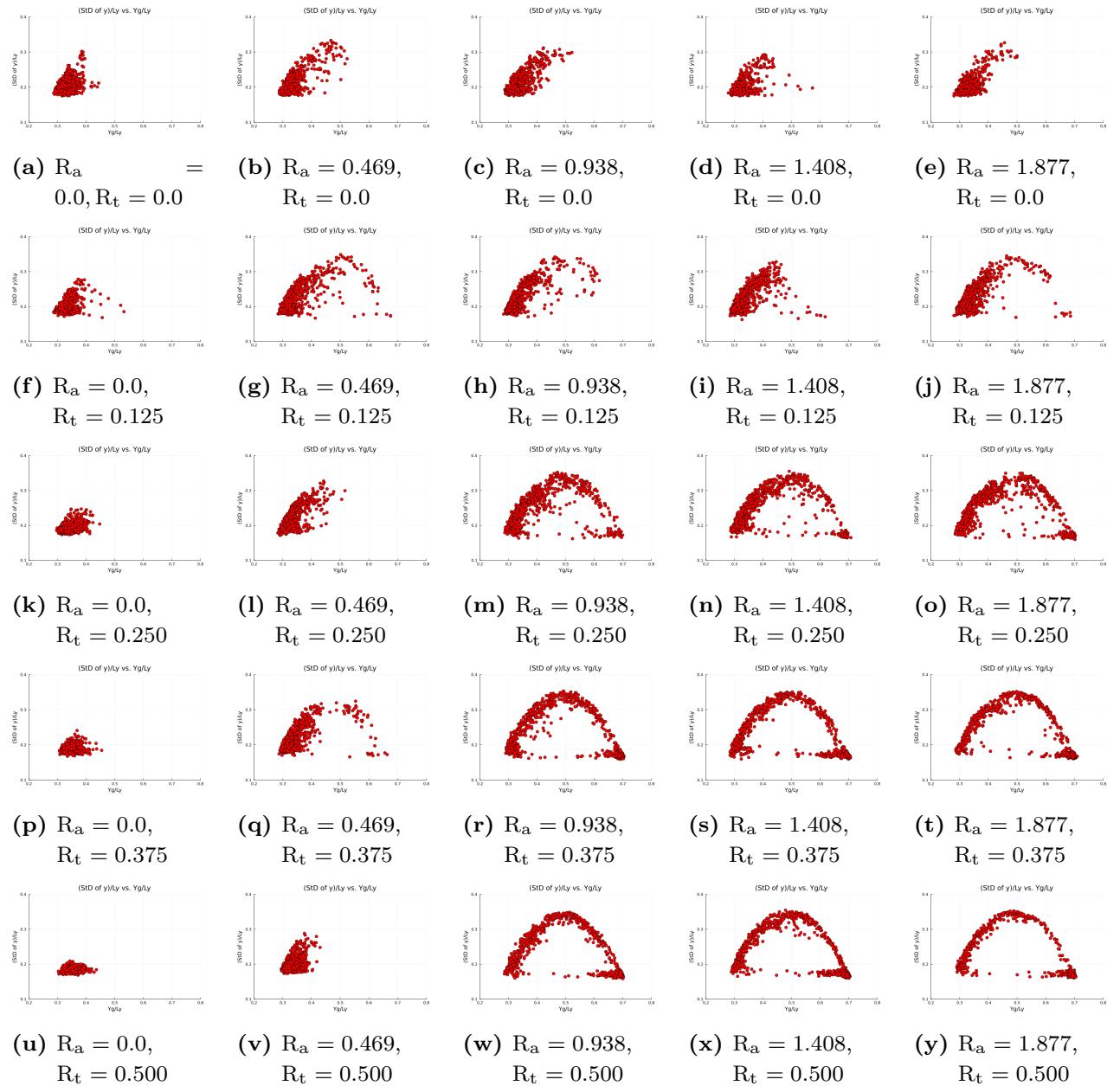


図 B.13: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.3.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

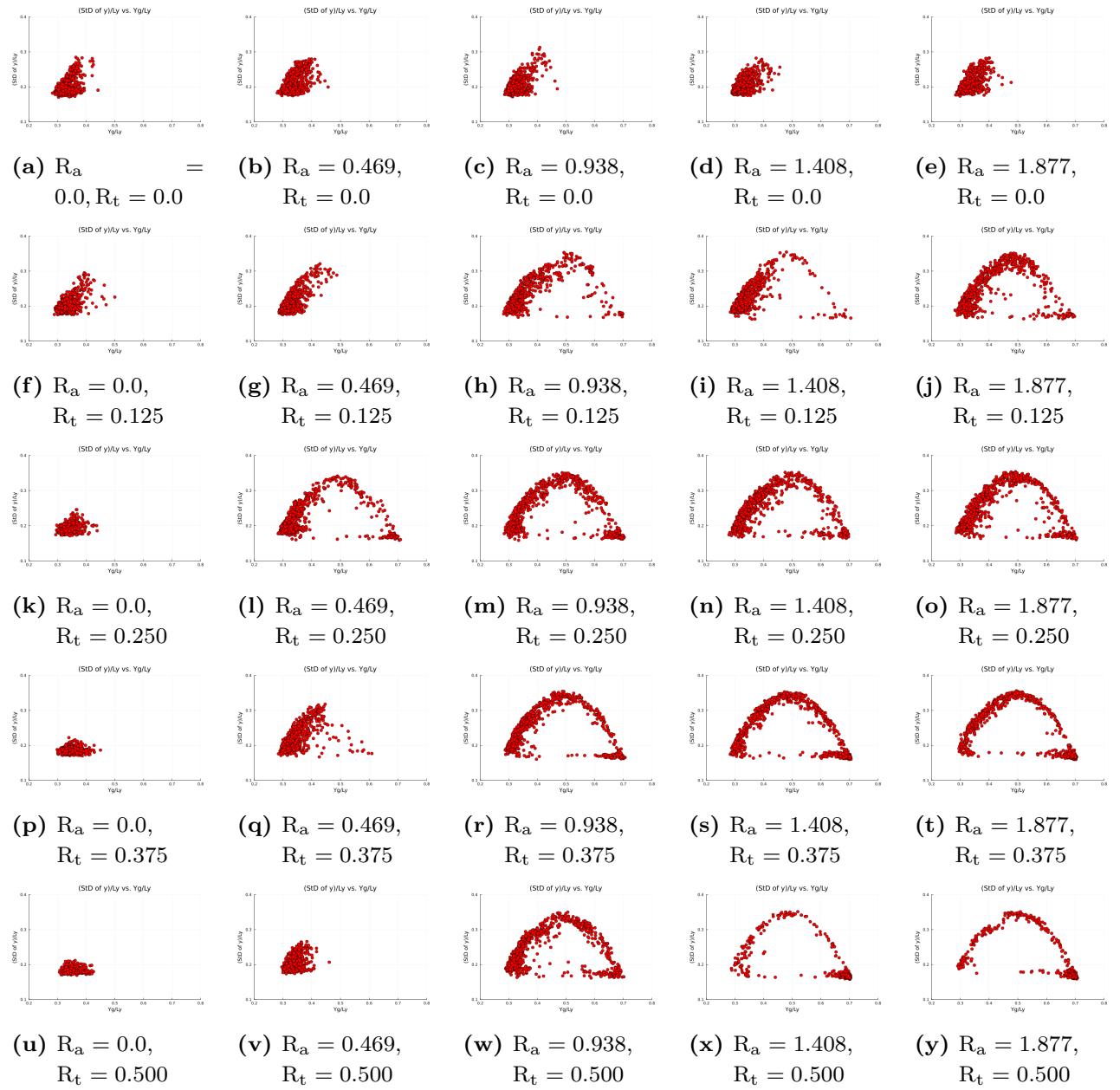


図 B.14: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.3.3 重力のみをかける

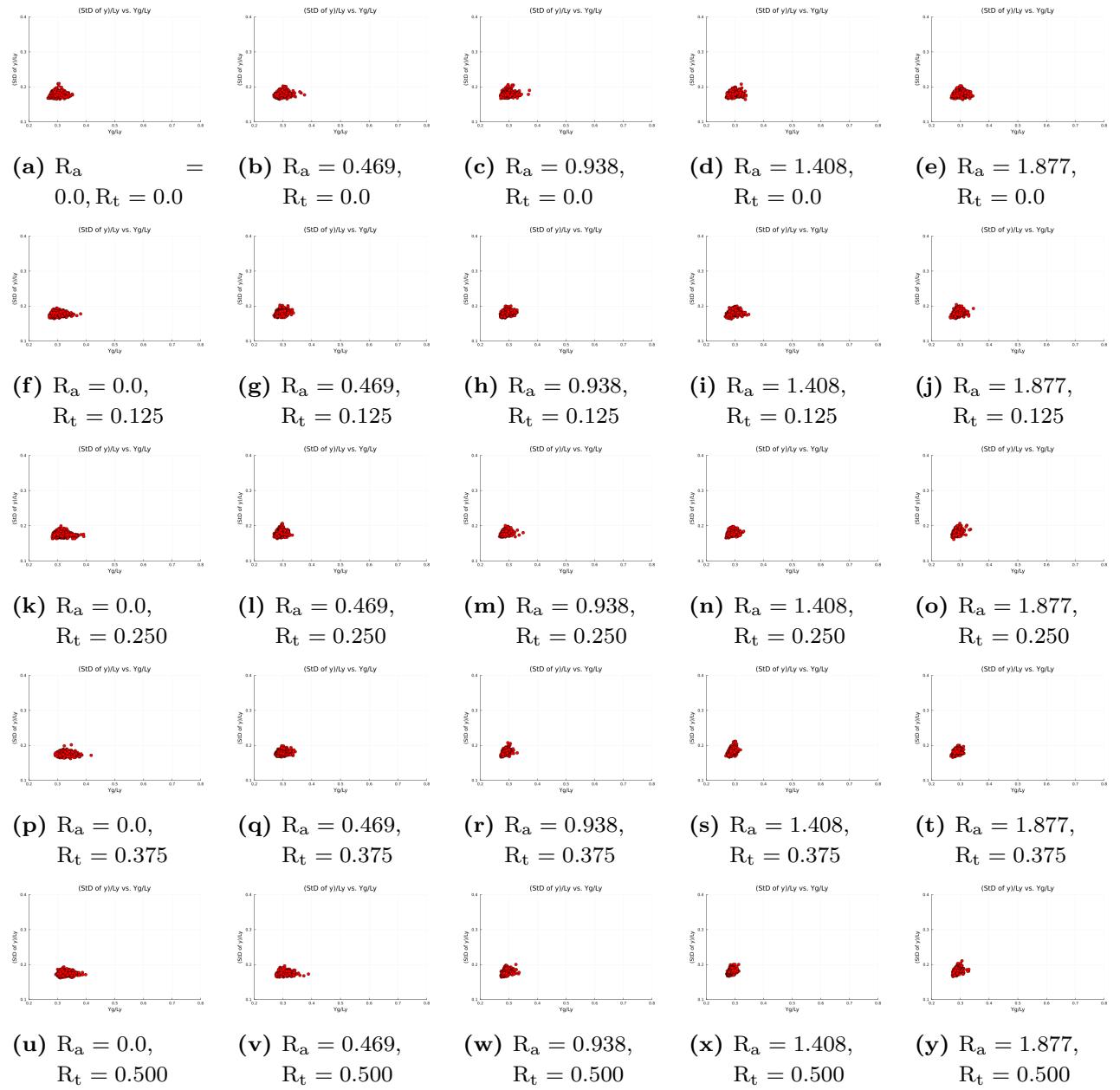


図 B.15: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.3.4 熱流のみをかける

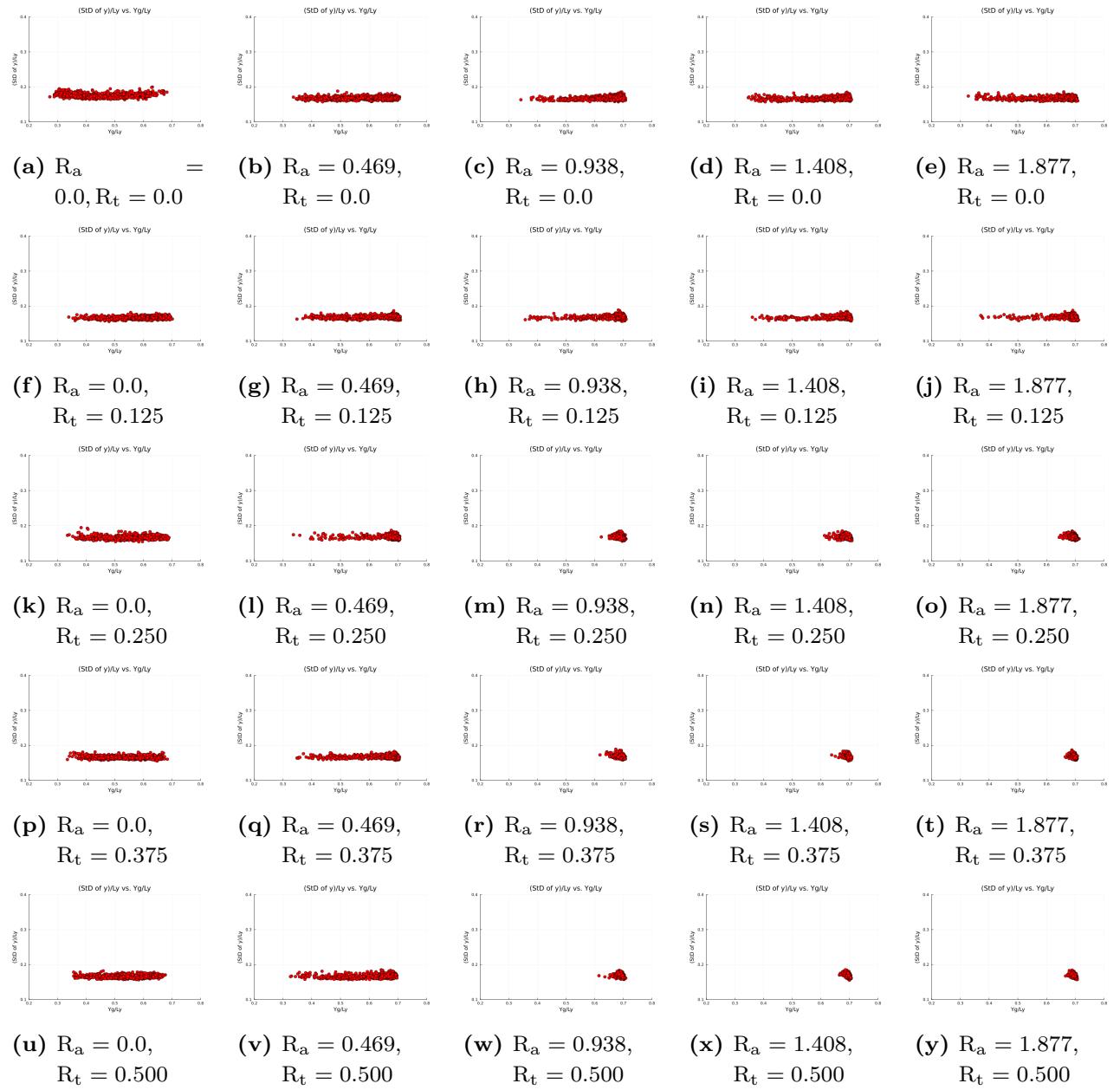


図 B.16: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.3.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

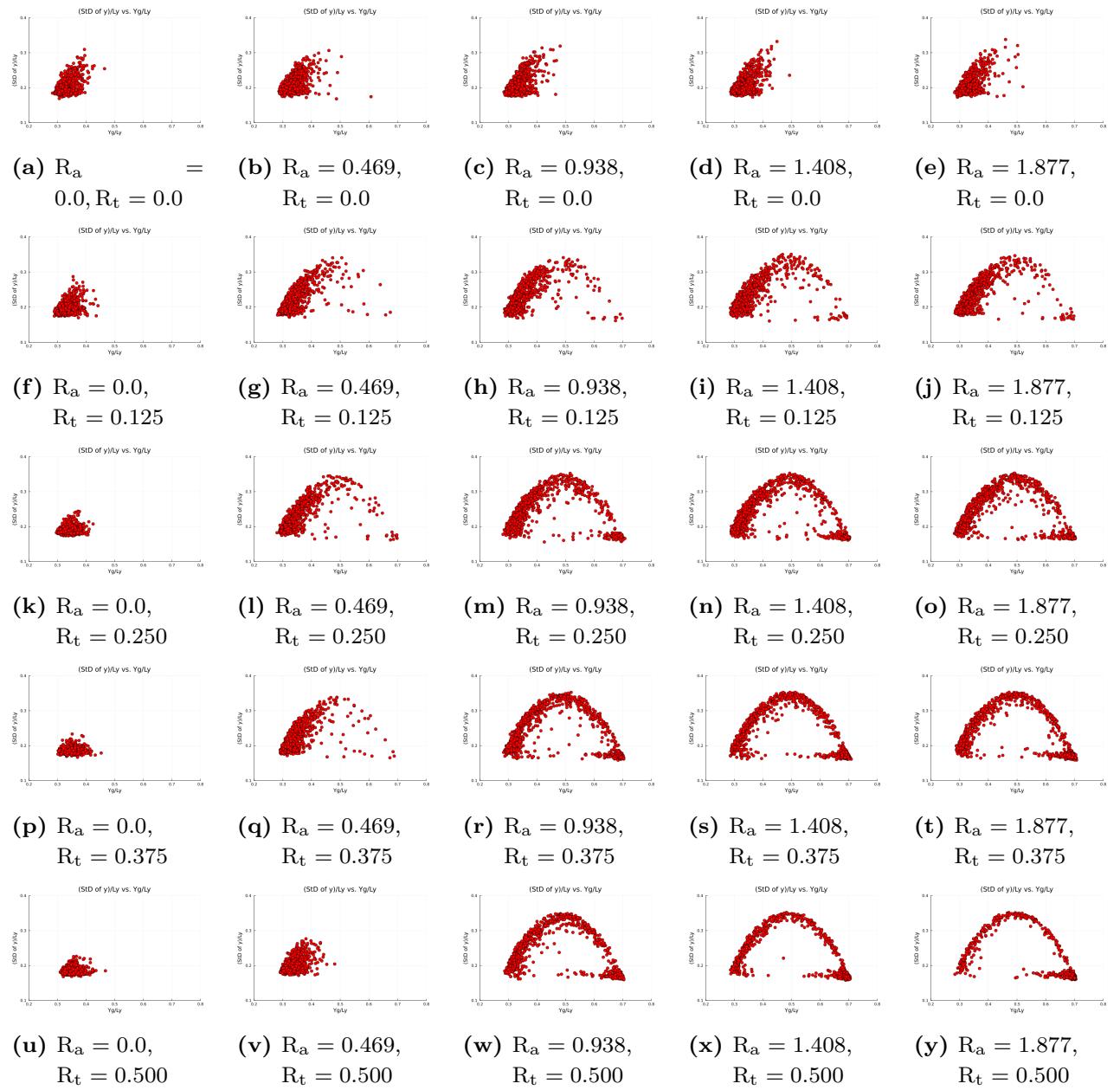


図 B.17: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.3.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

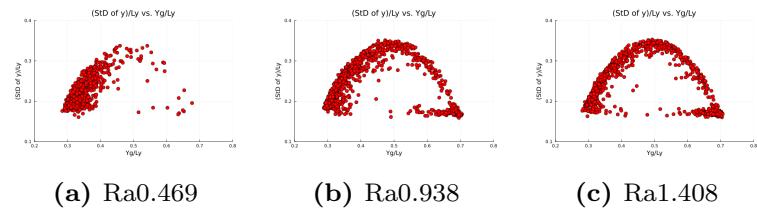


図 B.18: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.4 サイクル 3d

B.4.1 重力と熱流を同時にかける

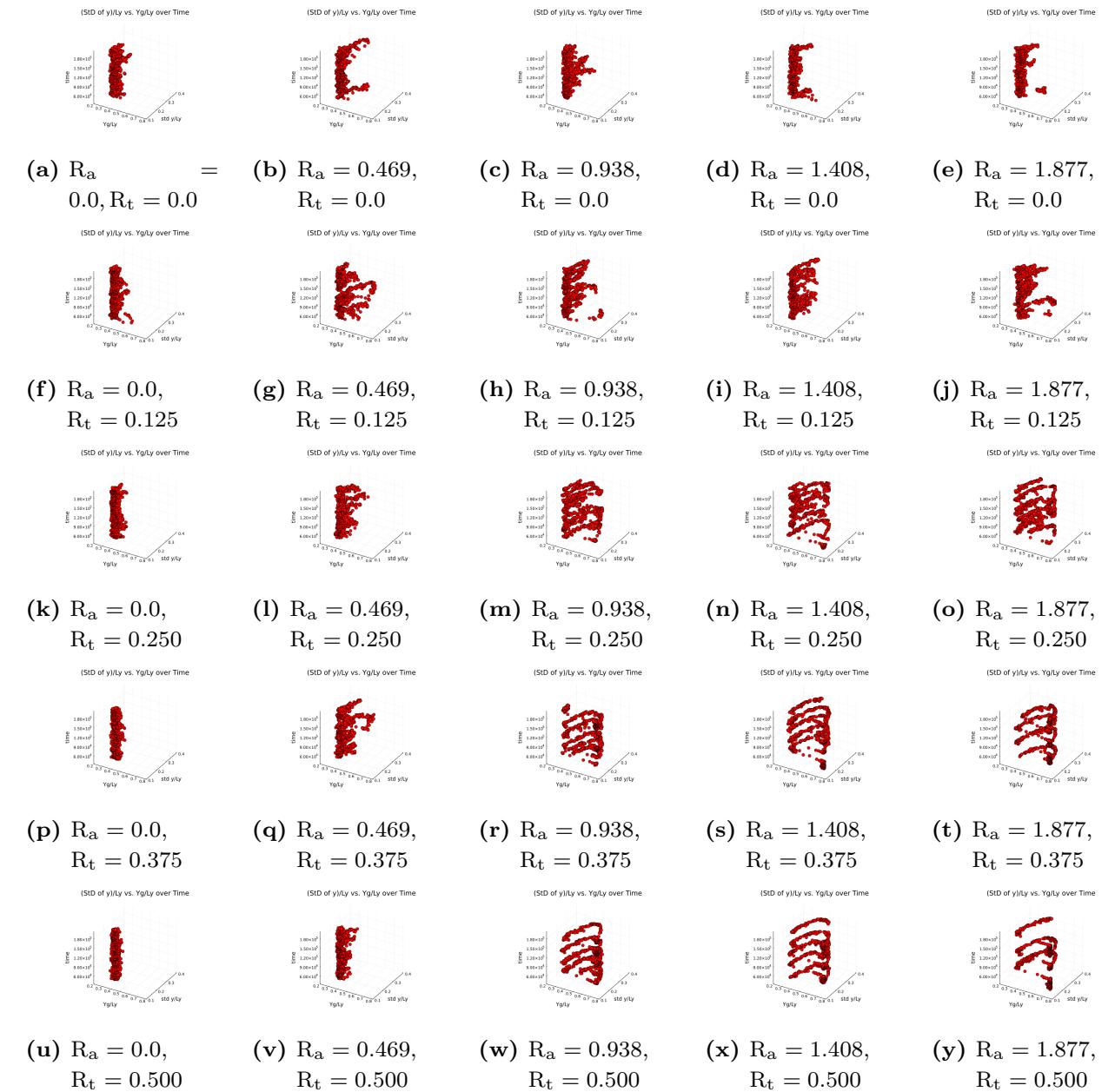


図 B.19: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.4.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

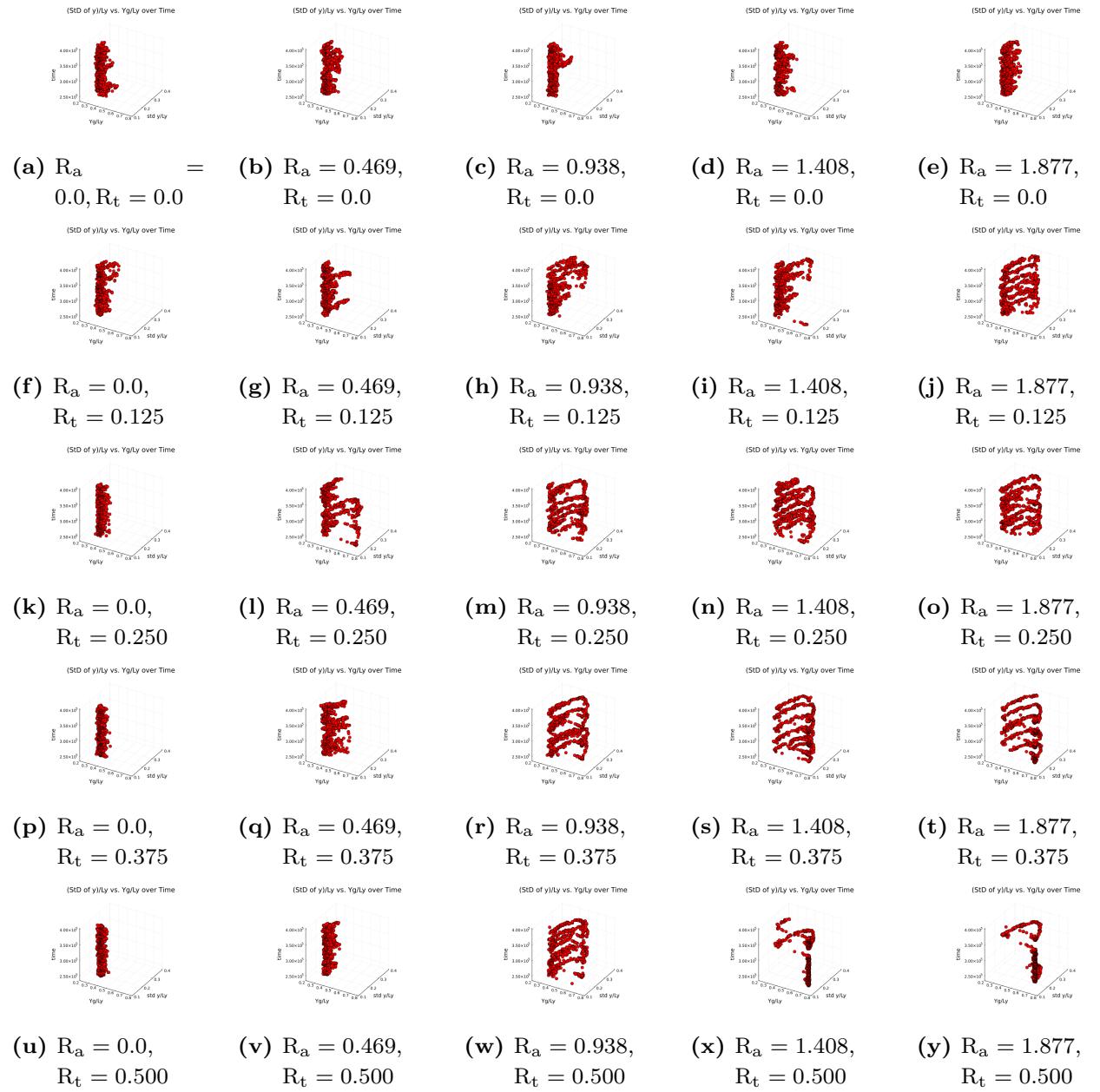


図 B.20: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

B.4.3 重力のみをかける

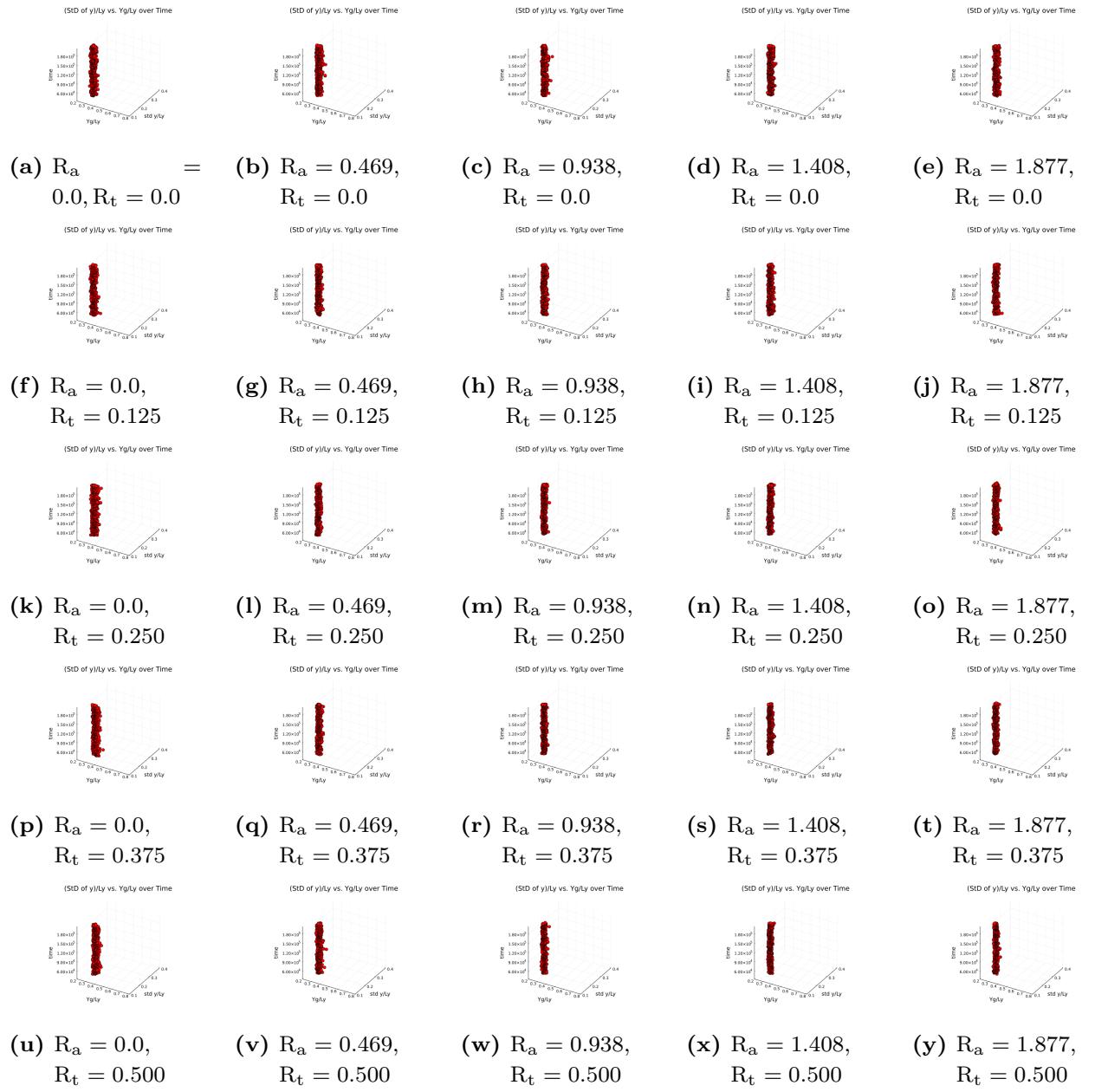


図 B.21: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.4.4 热流のみをかける

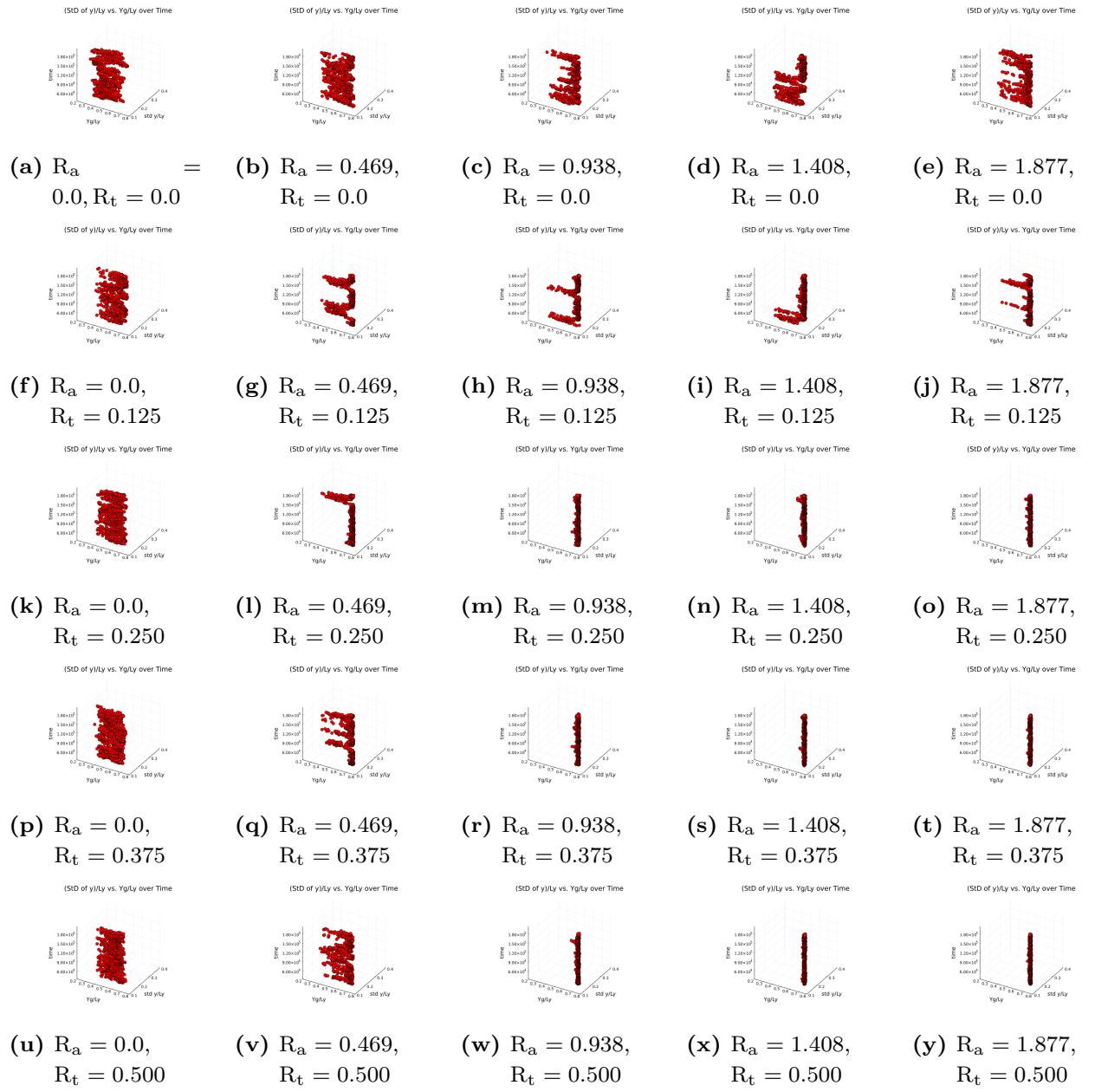


図 B.22: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.4.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

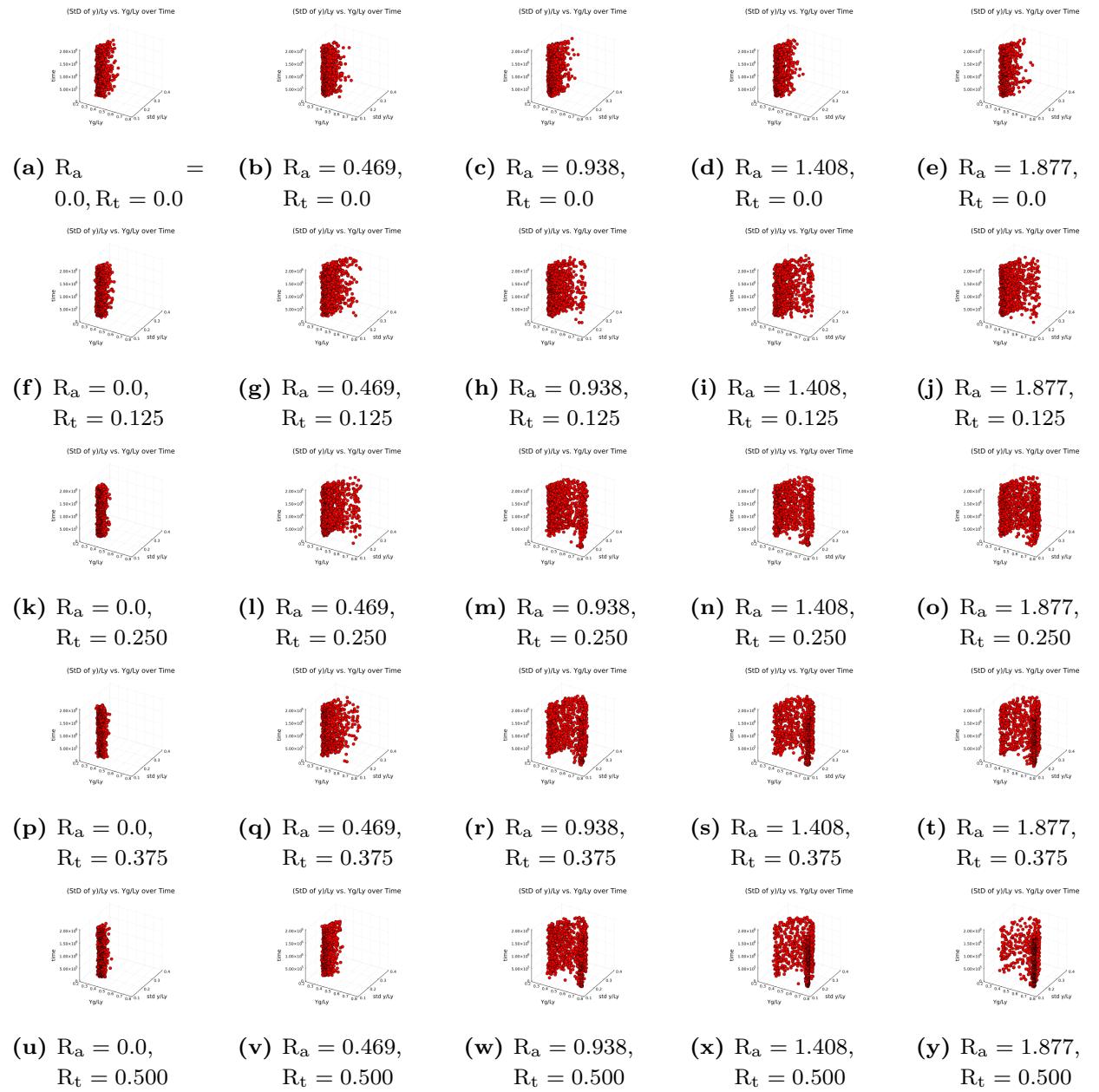


図 B.23: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.4.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

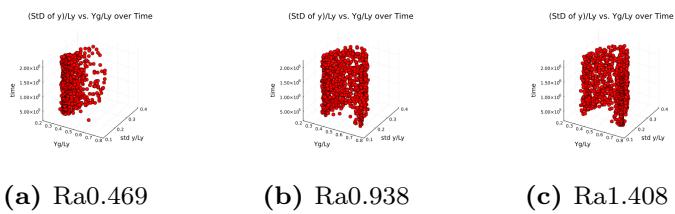


図 B.24: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

B.5 ヒートマップ

B.5.1 重力と熱流を同時にかける

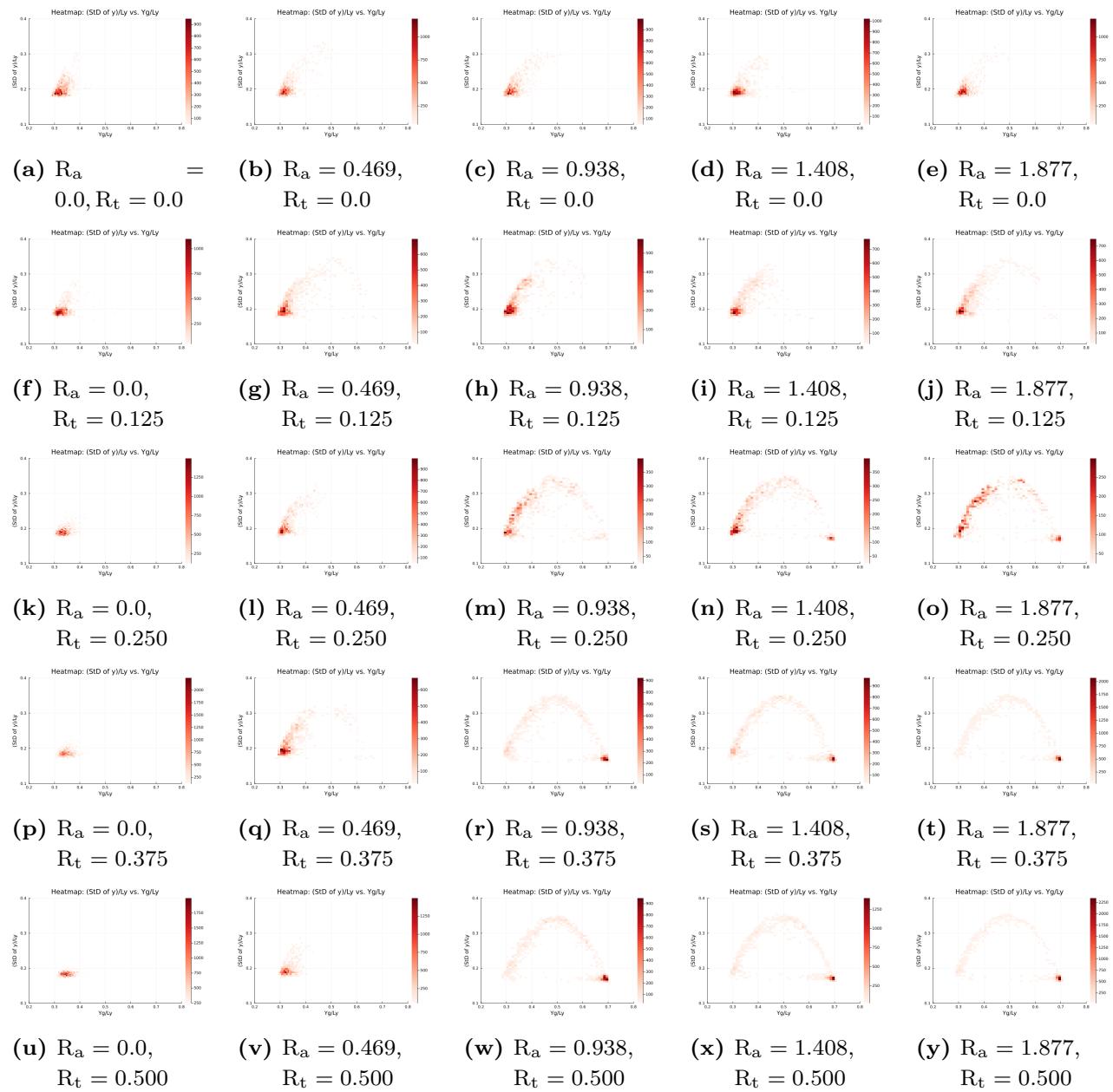


図 B.25: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

B.5.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

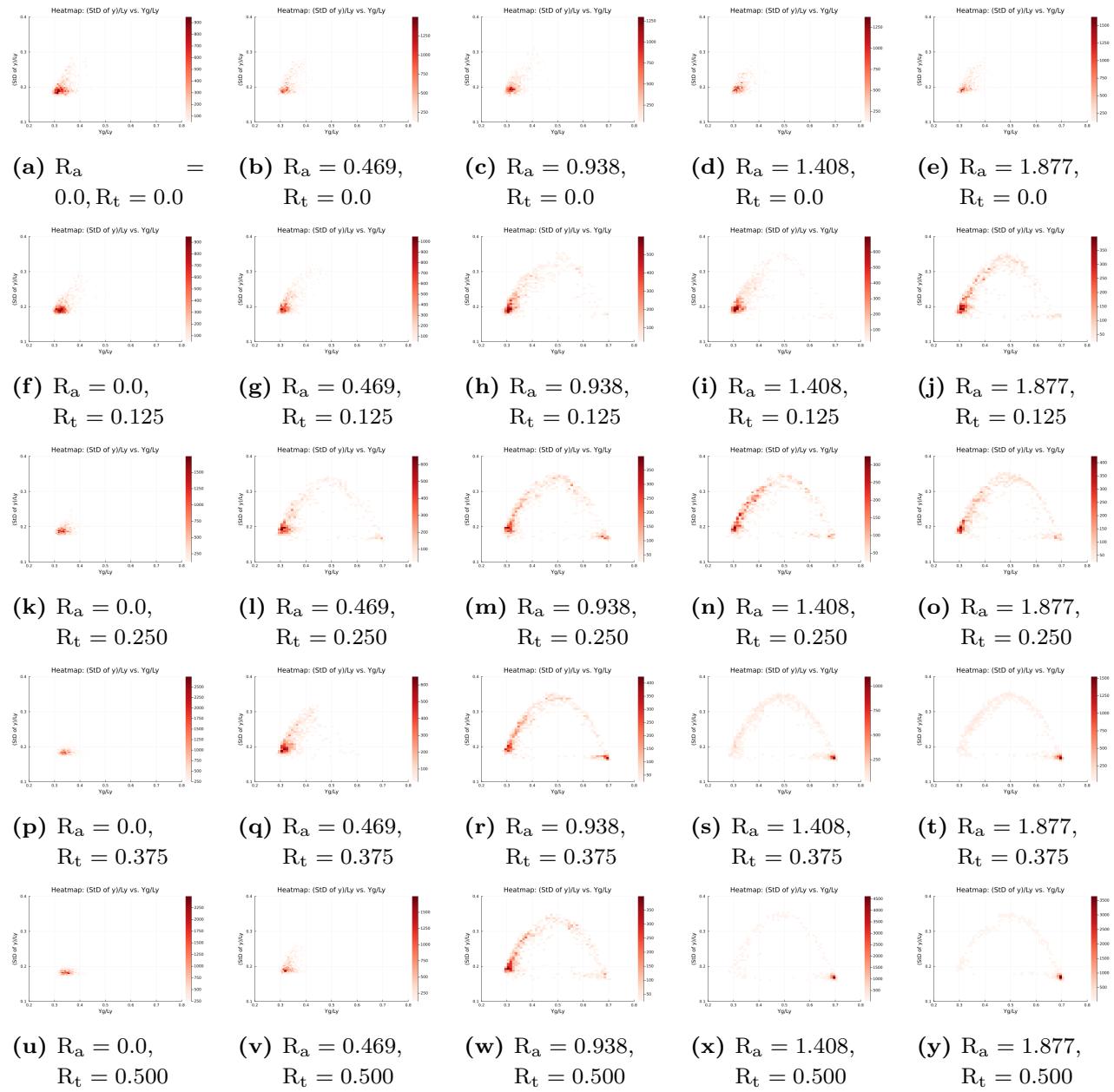


図 B.26: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

B.5.3 重力のみをかける

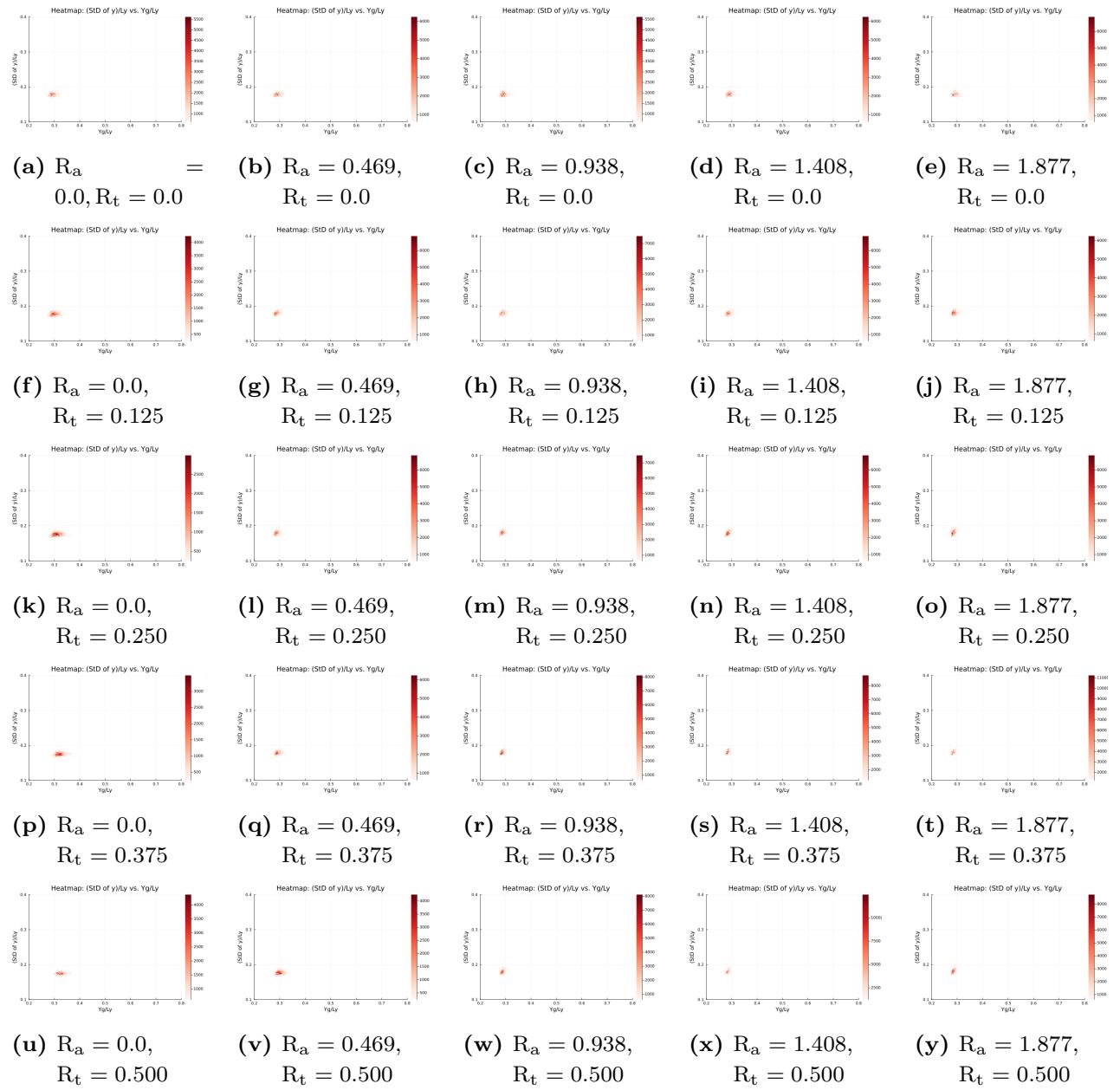


図 B.27: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.5.4 热流のみをかける

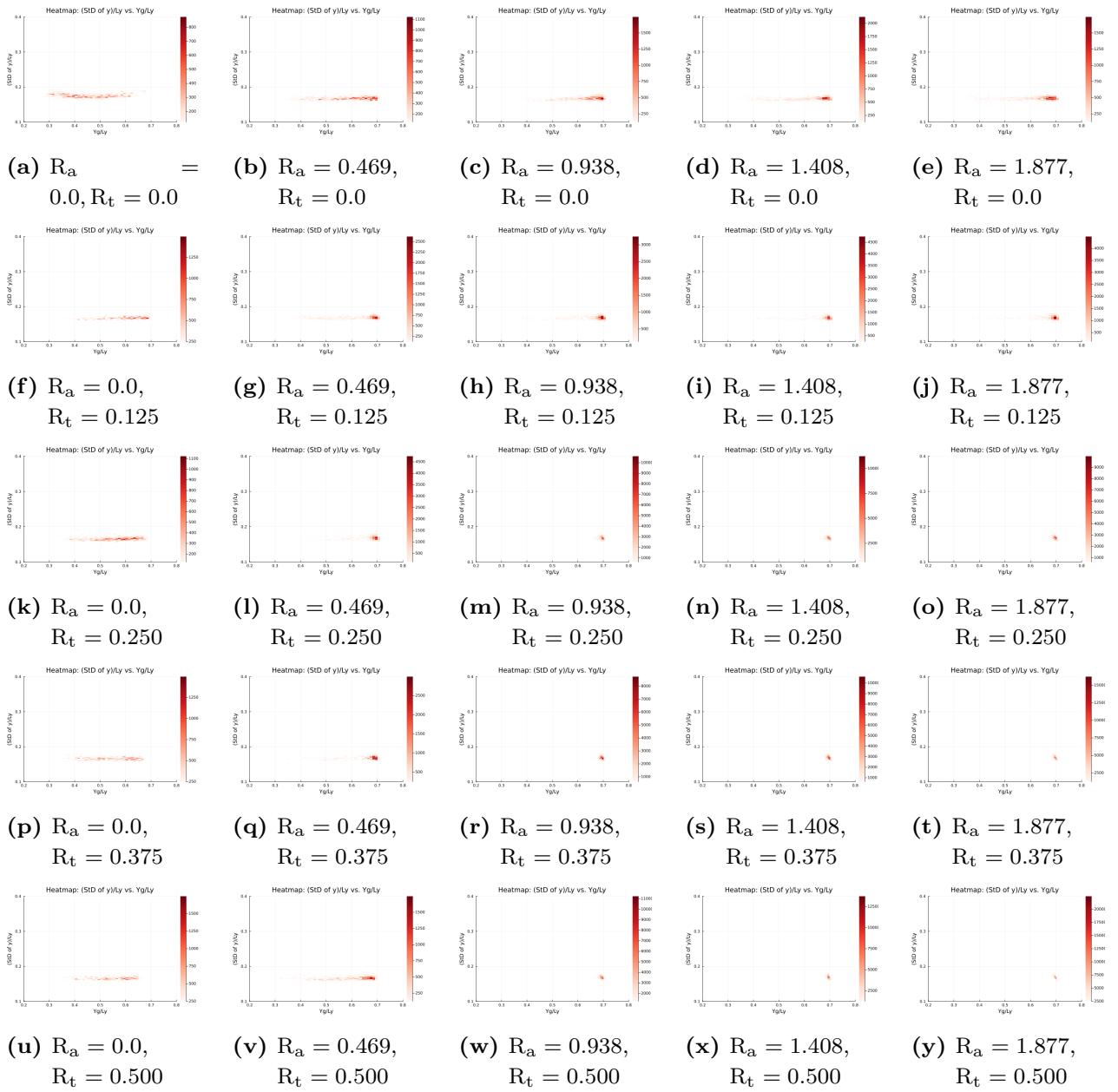


図 B.28: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

B.5.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

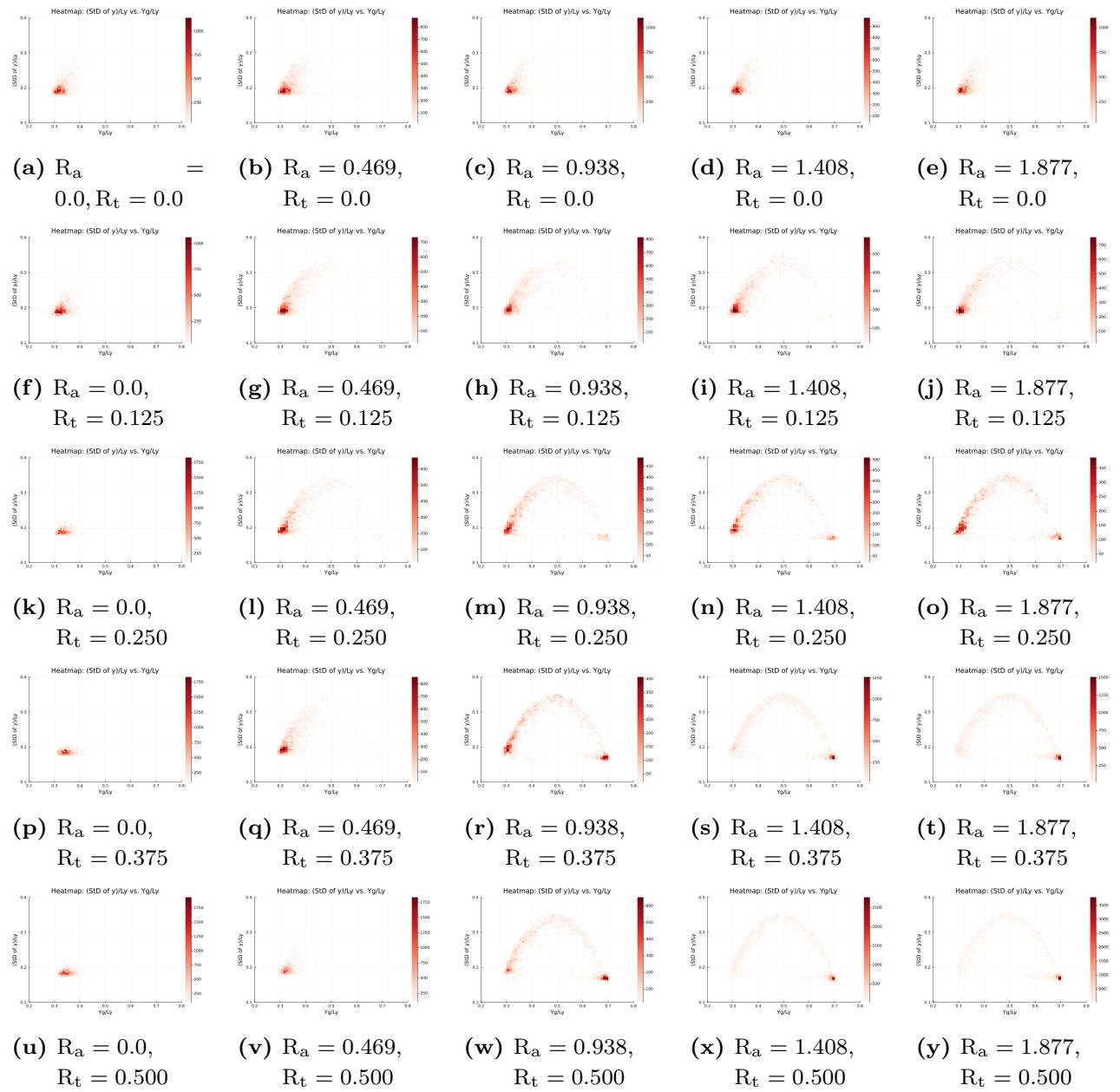


図 B.29: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット。

B.5.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

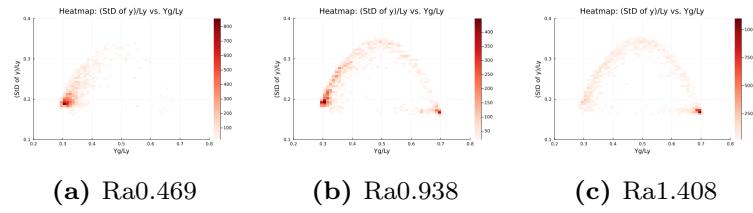


図 B.30: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

付録 C

ソースコード

再現しやすいようにソースコードを書き記す。リンク先の GitHub で、Report/src 内にファイルが保存されている。

C.1 LAMMPS ファイル

ソースコード C.1: in.2dLJ

```
1 # 2d Lennard-Jones
2
3
4 # 出力関係のパラメータ
5 variable run equal 40000000
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
   lammpstrj 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 50 # 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 0.4 # 密度。密度と粒子数から体積が決まる。
15 variable trange equal 5 # 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 0.43 # 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 0.02
20 variable thot equal ${T}+(${dT}/2) # 座標の小さい方の熱浴の目標
    温度.
21 variable tcold equal ${T}-(${dT}/2) # 座標の大きい方の熱浴の目標
    温度.
22 variable g equal 0.0004 # 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тенシャルの epsilon; ポ
    テンシャルの深さ.
25 variable sigma_pair equal 1.0 # LJ ポтен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тенシャル
28 variable Rd equal 0.0 # 乾き具合.
29 variable Rt equal 0.5 # 壁の厚み.
30 variable Ra equal 1.877538 # 濡れ具合.
31 variable epsilon_wall equal 1.0-${Rd} #
    LJ ポтенシャルの epsilon; ポтенシャルの深さ.
32 variable sigma_wall equal 0.5+${Rt} # LJ ポтенシャルの sigma;
    衝突直径.
33 variable rc_wall equal 1.122462+${Ra} #
    WCA ポтенシャルになるようなカットオフ長+alpha*sigma_wall.
34
35 # 領域関係のパラメータ
36     # 縦長のとき
37 variable box_xlo equal 0 # x の小さい方の直線.
38 variable box_xhi equal ${Ax} # x の大きい方の直線.
39 variable box_ylo equal -${gap} # y の小さい方の直線.
40 variable box_yhi equal ${Ay}-${gap} # y の大きい方の直線.
41 variable hotlo equal -${gap} # 熱浴で温度の低い方の小さい方の直
    線.
42 variable hothi equal -${gap}+${trange} # 熱浴で温度の低い方の大
    きい方の直線.
43 variable coldlo equal ${Ay}-${gap}-${trange} # 熱浴で温度の高
    い方の小さい方の直線.
44 variable coldhi equal ${Ay}-${gap} # 熱浴で温度の高い方の大きい
    方の直線.
45
46

```

```

47 # 系の設定
48 units lj # LJ 単位系.
49 atom_style atomic # 粒子.
50 dimension 2 # 次元.
51 timestep 0.005 # MD シミュレーションの timestep.
52 boundary p f p # x=1,y=m,z=n の直線が p だと周期境界条件.
53 lattice sq ${rho} # 粒子の初期配置. sq; 正方形セルの左隅に 1つ置
    <.
54 region box block ${box_xlo} ${box_xhi} ${box_ylo} ${box_yhi}
    } -0.1 0.1 # 系の領域設定.
55 region catom block 0 ${Ax} 0 ${Ay} -0.1 0.1 # 粒子生成の領域設
    定.
56 create_box 1 box # 系の生成.
57 create_atoms 1 region catom # 粒子の生成.
58 mass 1 1.0 # 粒子の設定.
59 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.
60
61 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 热
    浴C の領域.
62 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 热浴
    H の領域.
63
64 # 各热浴領域の温度を計算
65 compute Tcold all temp/region cold #
    c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.
66 compute Thot all temp/region hot #
    c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.
67
68 # 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル
69 pair_style lj/cut ${rc_pair}
70 pair_coeff 1 1 ${epsilon_pair} ${sigma_pair} ${rc_pair}
71 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.
72
73 # 高速化コマンド. neighbor list に入れる距離指定.
74 neighbor 0.3 bin
75 neigh_modify every 1 delay 0 check yes
76
77 # 系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あり, 今回
    の系は langevin 热浴を用いた nvt アンサンブルであることに注意.

```

```

78 fix 1 all nve
79
80 # 壁-粒子間相互作用ポテンシャル
81 fix wallylo all wall/lj126 ylo EDGE ${epsilon_wall} ${
82   sigma_wall} ${rc_wall} units box pbc yes
83 fix wallyhi all wall/lj126 yhi EDGE ${epsilon_wall} ${
84   sigma_wall} ${rc_wall} units box pbc yes
85
86 # langevin 热浴
87 fix hot all langevin ${T} ${T} 1.0 ${SEED} tally no # 热浴
88   H が温度 T になるようにする.
89 fix cold all langevin ${T} ${T} 1.0 ${SEED} tally no # 热浴
90   C が温度 T になるようにする.
91 fix_modify hot temp Thot
92 fix_modify cold temp Tcold
93
94 # 重力場
95 fix Gravity all gravity ${g} vector 0 -1 0
96
97 # 重力を热流をより先にかけるときコメントアウト解除.
98 # run 200000 # 重力のみでの平衡までの缓和时间
99
100 unfix hot # 热浴Hについての設定の解除.
101 unfix cold # 热浴Cについての設定の解除.
102
103 fix hot all langevin ${thot} ${thot} 1.0 ${SEED} tally no #
104   热浴が温度tlo になるようにする.
105 fix cold all langevin ${tcold} ${tcold} 1.0 ${SEED} tally no
106   # 热浴が温度thi になるようにする.
107 fix_modify hot temp Thot
108 fix_modify cold temp Tcold
109
110 # 重心计算 (Center of Mass)
111 compute CoM all com # c_CoM[1]でXg, c_CoM[2]でYg を取得.
112
113
114 # 出力コマンド
115 # lammpstrj
116 dump id all custom ${dump} output.lammpstrj id x y vx vy
117
118 # 画像

```

```

113 dump 2 all image ${image_step} image.*.jpg type type
114 dump_modify 2 pad 3
115
116 # log
117 thermo_style custom step time temp pe ke etotal c_CoM[2] #
    出力する物理量.
118
119 # YAML
120 fix extra all print ${thermo} """
121 -step:$step
122   time:$time
123   temp:$temp
124   ke:$ke
125   pe:$pe
126   etotal:$etotal
127   Yg:${c_CoM[2]}"""
128 file output.yaml screen no
129
130 # # 一次元プロファイル(今は温度と密度だけ計算と出力)
131 # compute chunk all chunk/atom bin/1d y lower 3.0 units box
132 # fix tempp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file
#     temp_profile.profile
133 # fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/
#     number file rho_profile.profile
134
135 thermo ${thermo} # 热力学量の出力.
136 thermo_modify norm no # 示量的な热力学量に调整.
137 run ${run} # 実行.

```

ソースコード C.2: in.2dLJ.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 # 分母の数だけ出力.(log,
#     yaml)
7 variable dump equal ${run}/1000 # 分母の数だけ出力.(lammpstrj)
8 variable image_step equal ${run}/1 # 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 5 # 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 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.
18 variable dT equal PLACEHOLDER_dT
19 variable thot equal ${T}+(${dT}/2) # 座標の小さい方の熱浴の目標
   温度.
20 variable tcold equal ${T}-(${dT}/2) # 座標の大きい方の熱浴の目
   標温度.
21 variable g equal PLACEHOLDER_g # 重力加速度.
22 # 粒子-粒子間のLJ ポテンシャル
23 variable epsilon_pair equal 1.0 # LJ ポтенシャルの epsilon; ポ
   テンシャルの深さ.
24 variable sigma_pair equal 1.0 # LJ ポтенシャルの sigma; 衝突直
   径.
25 variable rc_pair equal 3.0 # 典型的なカットオフ長.
26 # 壁-粒子間のLJ ポтенシャル
27 variable Rd equal PLACEHOLDER_Rd # 乾き具合.
28 variable Rt equal PLACEHOLDER_Rt # 壁の厚み.
29 variable Ra equal PLACEHOLDER_Ra # 濡れ具合.
30 variable epsilon_wall equal 1.0-${Rd} #
   LJ ポтенシャルの epsilon; ポтенシャルの深さ.
31 variable sigma_wall equal 0.5+${Rt} # LJ ポтенシャルの sigma;
   衝突直径.
32 variable rc_wall equal 1.122462+${Ra} #
   WCA ポтен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 hotlo equal -$gap # 热浴で温度の低い方の小さい方の直

```

```

    線.

41 variable hothi equal -${gap}+${trange} # 热浴で温度の低い方の大き
    い方の直線.

42 variable coldlo equal ${Ay}-${gap}-${trange} # 热浴で温度の高い方の小さい方の直線.

43 variable coldhi equal ${Ay}-${gap} # 热浴で温度の高い方の大きい方の直線.

44

45

46 # 系の設定

47 units lj # LJ 単位系.

48 atom_style atomic # 粒子.

49 dimension 2 # 次元.

50 timestep 0.005 # MD シミュレーションの timestep.

51 boundary p f p # x=l,y=m,z=n の直線が p だと周期境界条件.

52 lattice sq ${rho} # 粒子の初期配置. sq; 正方形セルの左隅に 1つ置く.

53 region box block ${box_xlo} ${box_xhi} ${box_ylo} ${box_yhi}
    } -0.1 0.1 # 系の領域設定.

54 region catom block 0 ${Ax} 0 ${Ay} -0.1 0.1 # 粒子生成の領域設定.

55 create_box 1 box # 系の生成.

56 create_atoms 1 region catom # 粒子の生成.

57 mass 1 1.0 # 粒子の設定.

58 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.

59

60 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 热浴C の領域.

61 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 热浴H の領域.

62

63 # 各热浴領域の温度を計算

64 compute Tcold all temp/region cold #
    c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.

65 compute Thot all temp/region hot #
    c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.

66

67 # 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル

68 pair_style lj/cut ${rc_pair}

69 pair_coeff 1 1 ${epsilon_pair} ${sigma_pair} ${rc_pair}

```

```

70 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.
71
72 # 高速化コマンド. neighbor list に入れる距離指定.
73 neighbor 0.3 bin
74 neigh_modify every 1 delay 0 check yes
75
76 # 系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あり, 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.
77 fix 1 all nve
78
79 # 壁-粒子間相互作用ポテンシャル
80 fix wallylo all wall/lj126 ylo EDGE ${epsilon_wall} ${
    sigma_wall} ${rc_wall} units box pbc yes
81 fix wallyhi all wall/lj126 yhi EDGE ${epsilon_wall} ${
    sigma_wall} ${rc_wall} units box pbc yes
82
83 # langevin 熱浴
84 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.
85 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.
86 fix_modify hot temp Thot
87 fix_modify cold temp Tcold
88
89 # 重力場
90 fix Gravity all gravity ${g} vector 0 -1 0
91
92 # # 重力を熱流より先にかける時にコメントアウトを解除.
93 # run 40000000 # 重力のみでの平衡までの緩和時間.
94
95 unfix hot # 熱浴H についての設定の解除.
96 unfix cold # 熱浴C についての設定の解除.
97
98 fix hot all langevin ${thot} ${thot} 1.0 ${SEED} tally no #
    熱浴が温度tlo になるようにする.
99 fix cold all langevin ${tcold} ${tcold} 1.0 ${SEED} tally no
    # 熱浴が温度thi になるようにする.
100 fix_modify hot temp Thot
101 fix_modify cold temp Tcold
102

```

```

103 # 重心計算 (Center of Mass)
104 compute CoM all com # c_CoM[1] で Xg, c_CoM[2] で Yg を取得.
105
106
107 # 出力コマンド
108 # lammpstrj
109 dump id all custom ${dump} PLACEHOLDER_outputtitle.
    lammpstrj id x y vx vy
110
111 # # 画像を生成するならコメントアウトを解除.
112 # dump 2 all image ${image_step} image.*.jpg type type
113 # dump_modify 2 pad 3
114
115 # log
116 thermo_style custom step time temp pe ke etotal c_CoM[2] #
    出力する物理量.
117
118 # YAML
119 fix extra all print ${thermo} """
120 -step: ${step}
121   time: ${time}
122   temp: ${temp}
123   ke: ${ke}
124   pe: ${pe}
125   etotal: ${etotal}
126   Yg: ${c_CoM[2]} """ file PLACEHOLDER_outputtitle.yaml
      screen no
127
128 # # 一次元プロファイル(今は温度と密度だけ計算と出力)
129 # compute chunk all chunk/atom bin/1d y lower 3.0 units box
130 # fix tempp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file
    temp_profile.profile
131 # fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/
    number file rho_profile.profile
132
133 thermo ${thermo} # 热力学量の出力.
134 thermo_modify norm no # 示量的な热力学量に调整.
135
136 run ${run} # 実行.

```

C.2 実行ファイル

ソースコード C.3: lammps_modexe.jl

```
1 #===
2 # LAMMPS シミュレーション実行と出力ファイル保管
3
4 このJulia コードは,LAMMPS 分子動力学シミュレーションを実行し,生成さ
5 れた出力ファイルを適切なディレクトリに保存します.
6
7 ## 機能
8 - ‘Glob’と‘Dates’パッケージを使用してファイルマッチングと日時取得
9 を行う
10 - パラメータを配列で定義
11 - LAMMPS ファイル内のプレースホルダーをパラメータ値に置き換えて,実
12 行用スクリプトを生成
13 - パラメータごとにLAMMPS を実行し,生成された出力ファイルを指定のデ
14 ィレクトリに移動
15 - 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除
16
17 ## 手順
18
19 1. LAMMPS ファイルの特定とパラメータ設定
20 2. パラメータの範囲を定義
21 3. パラメータの組み合わせごとにLAMMPS を実行
22 4. 出力ファイルを指定ディレクトリに保存
23 5. 使用済みの仮LAMMPS ファイルを削除
24
25 このコードは,異なるパラメータでのLAMMPS シミュレーションを自動化し,
26 出力ファイルの整理と保管を行います.
27 ===#
28
29 using Glob # ファイルパターンのマッチングに使用するパッケージ
30 using Dates # 日付と時刻の取得に使用するパッケージ
31
32 # 実行するLAMMPS ファイルを特定
33 lammpsfile = glob("in.*")[1]
34
35 # パラメータの設定
```

```

32 chi = 1.265
33 remark_text = "test"
34 file_extensions = ["log", "yaml", "lammpstrj"] # 出力ファイル
   の拡張子
35
36 # パラメータの範囲を設定
37 Ay_range = range(50, length=1) # Ay の範囲
38 rho_range = range(0.4, length=1) # 密度の範囲
39 T_range = range(0.43, length=1) # 初期温度の範囲
40 dT_range = range(0.04, length=1) # 热浴の温度差の範囲
41 Rd_range = range(0.0, length=1) # 乾燥度の範囲
42 Rt_range = range(0.0, 0.5, length=5) # 壁の厚みの範囲
43 Ra_range = range(0.0, 1.877538, length=5) # 引力幅の範囲
44 run_range = range(4e7, length=1) # 実行ステップ数の範囲
45
46 # パラメータごとに実験を実行
47 for Ay_value in Ay_range,
48     rho_value in rho_range,
49     T_value in T_range,
50     dT_value in dT_range,
51     Rd_value in Rd_range,
52     Rt_value in Rt_range,
53     Ra_value in Ra_range,
54     run_value in run_range
55
56 # パラメータに基づいて重力を計算
57 g_value = dT_value / ((Ay_value / sqrt(rho_value)) * chi
   )
58
59 # 実験日時を記録
60 n = string(now())
61
62 # パラメータに基づいた出力ファイル名を生成
63 parameter = "chi$(chi)_Ay$(Ay_value)_rho$(rho_value)_T$(
   T_value)_dT$(dT_value)_Rd$(Rd_value)_Rt$(Rt_value)_Ra$(
   Ra_value)_g$(g_value)_run$(run_value)"
64 outputtitle = "$(n)_$(remark_text)_$(parameter)"
65
66 # LAMMPS ファイルの内容を読み込み, パラメータを置換
67 template_script = read(lammpsfile, String)
68 mod_script = replace(template_script,

```

```

69      "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay_value),
70      "PLACEHOLDER_rho" => string(rho_value),
71      "PLACEHOLDER_T" => string(T_value),
72      "PLACEHOLDER_dT" => string(dT_value),
73      "PLACEHOLDER_g" => string(g_value),
74      "PLACEHOLDER_Rd" => string(Rd_value),
75      "PLACEHOLDER_Rt" => string(Rt_value),
76      "PLACEHOLDER_Ra" => string(Ra_value),
77      "PLACEHOLDER_run" => string(run_value),
78      "PLACEHOLDER_outputtitle" => string(outputtitle)
79  )
80
81  # 一意のファイル名を生成して仮ファイルを作成し, パラメータを書き
82  # 込む
83  tempfile = "in.temp_script_$(n)"
84  fp = open(tempfile, "w")
85  write(fp, mod_script)
86  close(fp)
87
88  # LAMMPS を実行
89  run('mpirun -n 4 lmp_mpi -log $(outputtitle).log -in $(
90    tempfile)')
91
92  # 出力ファイルを保存
93  for file_ext in file_extensions
94      files = glob("*.${(file_ext)}")
95      for file in files
96          outputpath = "../outputdir/${(file_ext)}dir"
97          mkpath(outputpath)
98          script = read(file, String)
99          fp = open(joinpath(outputpath, "${(file)}"), "w")
100
101         if file_ext == "log"
102             println(fp, "${(file)}")
103         end
104
105         write(fp, script)
106         close(fp)
107         rm(file)
108     end
109   end

```

```

108 end
109
110 # 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除
111 files = glob("in.temp_*")
112 for file in files
113     rm(file)
114 end

```

ソースコード C.4: lammps_qsub_job.jl

```

1 ====
2 # LAMMPS シミュレーション実行
3
4 このJulia コードは、LAMMPS 分子動力学シミュレーションを実行します。
5
6 ## 機能
7
8 - ‘Glob’と‘Dates’パッケージを使用してファイルマッチングと日時取得
   を行う。
9 - パラメータを配列で定義。
10 - LAMMPS ファイル内のプレースホルダーをパラメータ値に置き換えて、実
    行用スクリプトを生成。
11 - パラメータごとにLAMMPS を実行。
12
13 ## 手順
14
15 1. LAMMPS ファイルの特定とパラメータ設定。
16 2. パラメータの範囲を定義。
17 3. パラメータの組み合わせごとにLAMMPS を実行。
18
19 このコードは、異なるパラメータでの
   LAMMPS シミュレーションを自動化します。
20 ===#
21
22
23 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。
24 using Dates # 日時を取得するパッケージ。
25
26 # 実行するLAMMPS ファイルを特定
27 lammpsfile = glob("in.*")[1]
28
29 # パラメータの設定

```

```

30 chi = 1.265
31 remark_text = "test"
32
33 # パラメータの範囲を設定
34 Ay_range = range(100, length=1) # Ay の範囲
35 rho_range = range(0.4, length=1) # 密度の範囲
36 T_range = range(0.43, length=1) # 初期温度の範囲
37 dT_range = range(0.0, length=1) # 热浴の温度差の範囲
38 Rd_range = range(0.0, length=1) # 乾燥度の範囲
39 Rt_range = range(0.5, length=1) # 壁の厚みの範囲
40 Ra_range = range(0.0, 1.877538, length=5) # 濡れ具合の範囲
41 run_range = range(4e7, length=1) # 実行ステップ数の範囲
42
43 # 多重ループを用いてパラメータごとに実験を実行.
44 for Ay_value in Ay_range,
45     rho_value in rho_range,
46     T_value in T_range,
47     dT_value in dT_range,
48     Rd_value in Rd_range,
49     Rt_value in Rt_range,
50     Ra_value in Ra_range,
51     run_value in run_range
52
53 # パラメータに基づいて重力を計算
54 g_value = dT_value / ((Ay_value / sqrt(rho_value)) * chi
55 )
56
57 # 実験日時を記録
58 n = string(now())
59
60 # パラメータに基づいた出力ファイル名を生成
61 parameter = "chi$(chi)_Ay$(Ay_value)_rho$(rho_value)_T$(
62     T_value)_dT$(dT_value)_Rd$(Rd_value)_Rt$(Rt_value)_Ra$(
63     Ra_value)_g$(g_value)_run$(run_value)"
64 outputtitle = "$(n)_$(remark_text)_$(parameter)"
65
66 # LAMMPS ファイルの内容を読み込み、パラメータを置換
67 template_script = read(lammpsfile, String)
68 mod_script = replace(template_script,
69     "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay_value),
70     "PLACEHOLDER_rho" => string(rho_value),

```

```

68     "PLACEHOLDER_T" => string(T_value),
69     "PLACEHOLDER_dT" => string(dT_value),
70     "PLACEHOLDER_g" => string(g_value),
71     "PLACEHOLDER_Rd" => string(Rd_value),
72     "PLACEHOLDER_Rt" => string(Rt_value),
73     "PLACEHOLDER_Ra" => string(Ra_value),
74     "PLACEHOLDER_run" => string(run_value),
75     "PLACEHOLDER_outputtitle" => string(outputtitle)
76 )
77
78 # 一意のファイル名を生成して仮ファイルを作成し、パラメータを書き込む
79 tempfile = "in.temp_script_$(n)"
80 fp = open(tempfile, "w")
81 write(fp, mod_script)
82 close(fp)
83
84 # LAMMPS を実行
85 run('myqsub -Q ness -C 4 -N g0Ra$(Ra_value) mpirun -n 4
86 lmp_mpi -log $(outputtitle).log -in $(tempfile)')
87 end

```

ソースコード C.5: lammps_qsub_out.jl

```
1 #=====
2 # 出力ファイル保管
3
4 このJulia コードは,
    LAMMPS 分子動力学シミュレーションの実行によって生成された出力ファイルを
    ,適切なディレクトリに保存します .
5
6 ## 機能
7
8 - ‘Glob’パッケージを使用してファイルマッチングを行う .
9 - パラメータごとに
    LAMMPS を実行したことによって生成された出力ファイルを ,指定のディ
    レクトリに移動 .
10 - 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除 .
11
12 ## 手順
13
```

```

14 1. 出力ファイルを指定ディレクトリに保存.
15 2. 使用済みの仮LAMMPS ファイルを削除.
16
17 このコードは、出力ファイルの整理と保管を行います。
18 ===#
19
20 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.
21
22 file_extensions = ["log", "yaml", "lammpstrj"] # 出力ファイル
23 の拡張子
24
25 # 出力ファイルを保存
26 for file_ext in file_extensions
27   files = glob("*.$(file_ext)")
28   for file in files
29     outputpath = "../outputdir/${file_ext}dir"
30     mkpath(outputpath)
31     script = read(file, String)
32     fp = open(joinpath(outputpath, "$(file)"), "w")
33
34     if file_ext == "log"
35       println(fp, "$(file)")
36     end
37
38     write(fp, script)
39     close(fp)
40     rm(file)
41   end
42 end
43
44 # 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除
45 files = glob("in.temp_*")
46 for file in files
47   rm(file)
48 end

```

C.3 プロットファイル

ソースコード C.6: plot_LJpotential.jl

```

1 # 汎用LJ ポテンシャル描画セル.
2 # パッケージ.
3 using Plots
4
5 # 関数定義.
6 function theta(r) # 階段関数.
7     return r > 0 ? 1 : 0
8 end
9 function phi(epsilon, sigma, r) # LJ ポテンシャル.
10    return 4.0 * epsilon * ((sigma/r)^12 - (sigma/r)^6)
11 end
12 function phi_tilde(r, epsilon, sigma, rc) # シフトアップとカットオフ.
13    return (phi(epsilon, sigma, r) - phi(epsilon, sigma, rc
14        )) * theta(rc - r)
15 end
16
17 # 粒子-粒子LJ ポテンシャルのパラメータ.
18 epsilon = 1.0
19 sigma = 1.0
20 rc = 3.0 * sigma
21
22 # Rd, Rt, Ra の配列.
23 Rd_values = range(0.0, length=1)
24 Rt_values = range(0.0, 0.5, length=5)
25 Ra_values = range(1.877, length=1)
26
27 # プロット概形.
28 plot(xlabel="r/σ", ylabel="^cf^95/ε")
29 xlims!(0.2, 2.5)
30 ylims!(-1.5, 3.0)
31 title!("LJ-Potential vs. r")
32 xlabel!("r/σ")
33 ylabel!("^cf^95/ε")
34
35 # 粒子-粒子LJ ポテンシャルのプロット.
36 plot!(r -> phi_tilde(r, epsilon, sigma, rc), label="
    Potential_pair; ε=$(round(epsilon,digits=1)), σ=$(round(
        sigma,digits=1)), rc=$(round(3.0,digits=2)) σ",
        linestyle=:dash)

```

36

```

37 # プロットの追加.
38 for Rd in Rd_values,
39     Rt in Rt_values,
40     Ra in Ra_values
41     # 壁-粒子LJ ポテンシャルのパラメータ.
42     epsilon_wall = (1.0 - Rd) * epsilon
43     sigma_wall = (0.5 + Rt) * sigma
44     rc_wall = ((2 ^ (1 / 6)) + Ra) * sigma_wall
45     # 打つ点を調整.
46     x_values = range(Rt+0.3,3.0,length=10000)
47     y_values = phi_tilde.(x_values, epsilon_wall, sigma_wall
48                 , rc_wall)
49     # 壁-粒子LJ ポтенシャルのプロット.
50     plot!(x_values, y_values, label="Potential_wall;  $\epsilon$  w=$(round(epsilon_wall,digits=1))  $\sigma$  , $\sigma$ w=$(round(sigma_wall,digits=1))  $\sigma$  , $\sigma$ rcw=$(round((2^(1/6))+Ra,digits=2))  $\sigma$  w=$(round(((2^(1/6))+Ra)*sigma_wall,digits=2))  $\sigma$ ", linestyle=:dash)
51 end
52 display(plot!())
53 # savefig("")
54
55 ccall(:jl_tty_set_mode, Int32, (Ptr{Cvoid}, Int32), stdin.
56     handle, true)
57 read(stdin, 1)

```

参考文献

- [1] 渡邊孝信. 分子動力学法と原子間ポテンシャル. 森北出版, 2023.
- [2] 蔵本由紀. リズム現象の世界. 東京大学出版会, 2013.