

# 学士学位論文

## 壁の濡れ性による非平衡流体系ダイナミクスの変化

山本 凜<sup>\*1</sup>

最終更新日: 2024 年 2 月 15 日  
2023 年度 (令和 5 年)

<sup>\*1</sup> 茨城大学 理学部理学科物理学コース 20S2035Y

# 目次

概要	2
第 1 章 系の設定	3
1.1 ハミルトニアン	4
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	6
1.2 熱流	7
第 2 章 まとめ	9
2.1 壁の濡れ性と周期的なダイナミクス	9
2.2 ダイナミクスとリミットサイクル	9
謝辞	9
付録 A 研究手法	11
A.1 LAMMPS	11
A.2 Lennard-Jones potential	11
A.3 ディレクトリ構造	11
付録 B ソースコード	12
B.1 LAMMPS ファイル	12
B.2 実行ファイル	21
B.3 プロットファイル	28
参考文献	31

# 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。先行研究によると、フタの裏に強い濡れ性を与えると、流体系は非定常で周期的なダイナミクスを示すことが分かっている。これは、「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、例にやかんを使うと、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、上下に濡れた壁が付き、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。

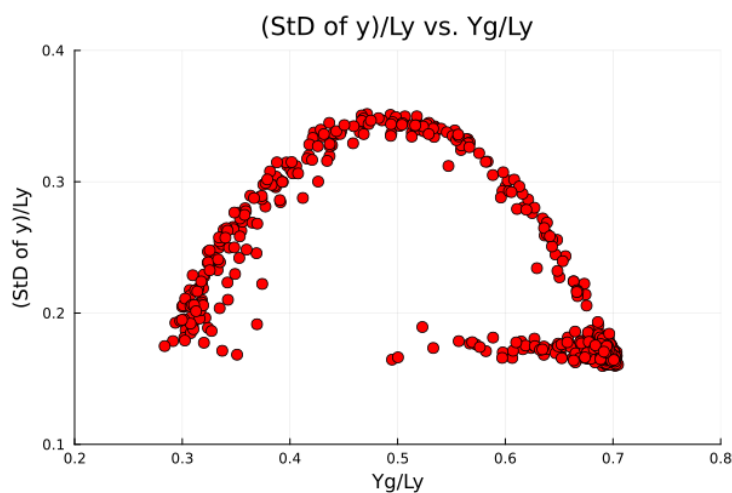


図 1

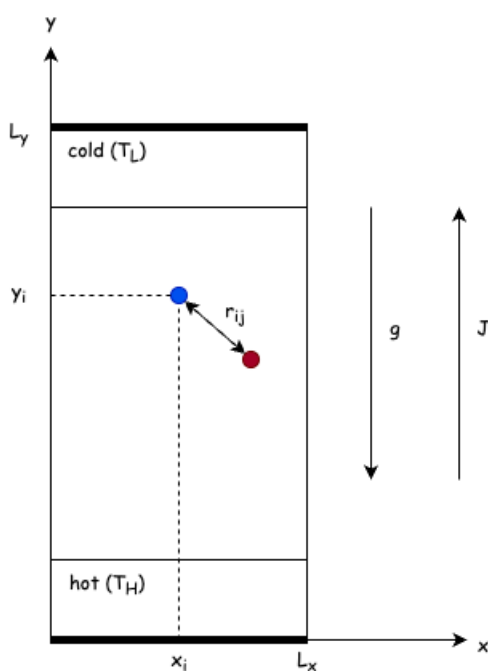
# 第 1 章

## 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 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 1.1)

図 1.1



## 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, 本節はこのハミルトニアンに至るまでの過程を述べる.

### 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.

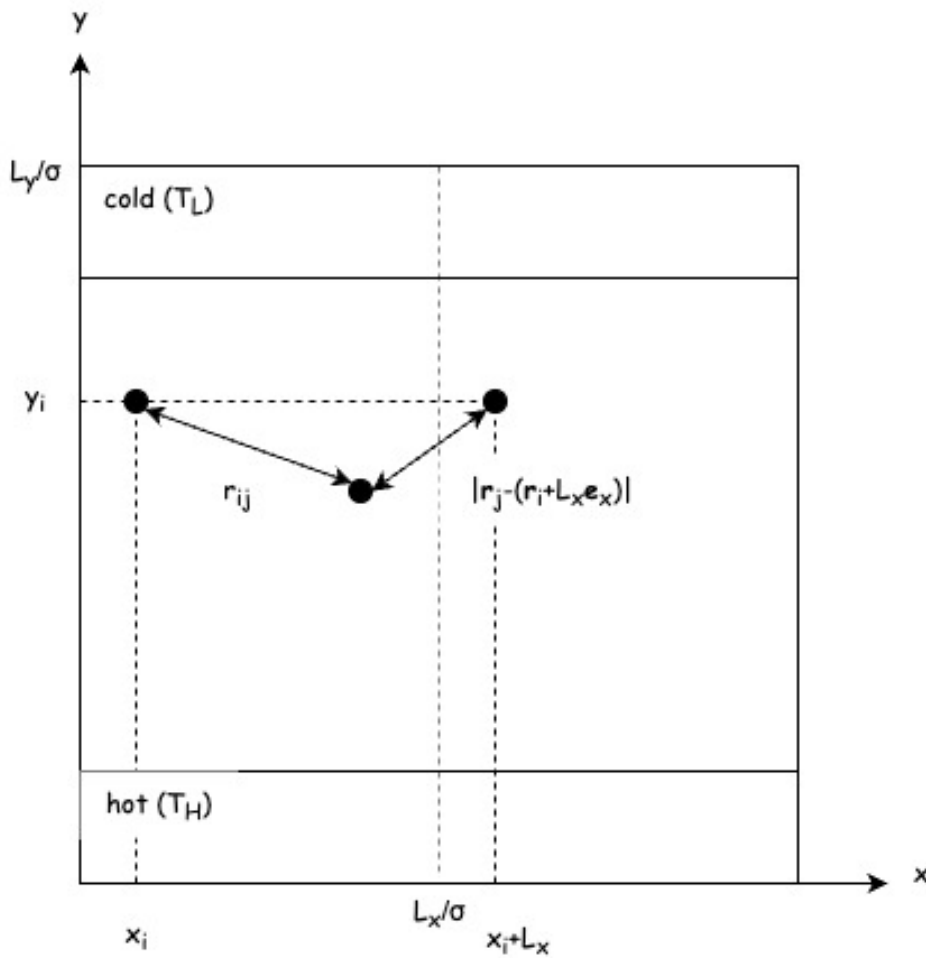
### 1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約

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

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

ここで,  $n_x = 0$ ; 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



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,

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

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、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。

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

### 1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル

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

パラメータは以下のようにする。

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

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、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.

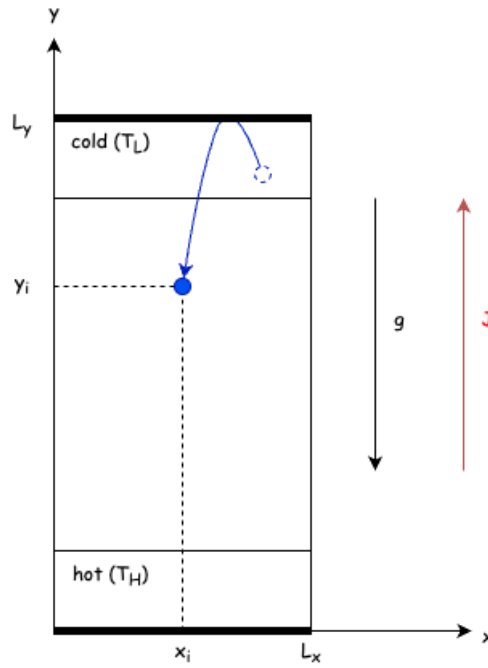


図 1.3

粒子  $i$  が熱浴に侵入すると, その粒子の運動は以下のランジュバン方程式に従う.

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

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



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

粒子がそれぞれの熱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る.

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

## 第 2 章

# まとめ

### 2.1 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.

### 2.2 ダイナミクスとリミットサイクル

周期的なダイナミクスがはっきり現れている時にはリミットサイクルもはっきりと現れる.

# 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お忙しい中にも関わらず、研究の相談に乗ってくださり、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

A.2 Lennard-Jones potential

A.3 ディレクトリ構造

## 付録 B

# 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.

### B.1 LAMMPS ファイル

ソースコード B.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
   lammprj 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 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 # 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 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 ポテンシャルの epsilon;
    ポテンシャルの深さ.
32 variable sigma_wall equal  $0.5+\{Rt\}$  # LJ ポテンシャルの sigma; 衝突
    直径.
33 variable rc_wall equal  $1.122462+\{Ra\}$  #
    WCA ポテン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=l,y=m,z=n の直線が周期境界条件.
53 lattice sq ${rho} # 粒子の初期配置. sq; 正方形セルの左隅に 1つ置く.
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 # 縦長のとき
62 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 熱浴
    C の領域.
63 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 熱浴H の領域
    .
64
65 # 各熱浴領域の温度を計算
66 compute Tcold all temp/region cold #
    c_Tcold で cold 熱浴領域の温度を取得.
67 compute Thot all temp/region hot #
    c_Tcold で cold 熱浴領域の温度を取得.
68
69 # 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル
70 pair_style lj/cut ${rc_pair}
71 pair_coeff 1 1 ${epsilon_pair} ${sigma_pair} ${rc_pair}
72 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.
73
74 # 高速化コマンド. neighbor list に入れる距離指定.
75 neighbor 0.3 bin

```

```

76 neigh_modify every 1 delay 0 check yes
77
78 # 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.
79 fix 1 all nve
80
81 # 壁-粒子間相互作用ポテンシャル
82 # 縦長のとき
83 fix wallylo all wall/lj126 ylo EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall}
   ${rc_wall} units box pbc yes
84 fix wallyhi all wall/lj126 yhi EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall}
   ${rc_wall} units box pbc yes
85
86 # langevin 熱浴
87 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.
88 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.
89 fix_modify hot temp Thot
90 fix_modify cold temp Tcold
91
92 # 重力場
93 fix Gravity all gravity ${g} vector 0 -1 0
94
95 # 重力を熱流をより先にかけるとときコメントアウト解除.
96 # run 200000 # 重力のみでの平衡までの緩和時間
97 # unfix hot # 熱浴H についての設定の解除.
98 # unfix cold # 熱浴C についての設定の解除.
99
100 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.
101 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.
102 fix_modify hot temp Thot
103 fix_modify cold temp Tcold
104
105 # 重心計算 (Center of Mass)
106 compute CoM all com # c_CoM[1]でXg, c_CoM[2]でYg を取得.

```



```

107
108
109 # 出力コマンド
110 # VMD
111 dump id all custom ${dump} output.lammpstrj id x y vx vy
112
113 # 画像
114 dump 2 all image ${image_step} image.*.jpg type type
115 dump_modify 2 pad 3
116
117 # log
118 thermo_style custom step time temp pe ke etotal c_CoM[2] # 出力する物理量.
119
120 # YAML
121 fix extra all print ${thermo} ""
122   step:$(step)
123   time:$(time)
124   temp:$(temp)
125   ke:$(ke)
126   pe:$(pe)
127   etotal:$(etotal)
128   Yg:$(c_CoM[2])"" 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 temp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file
133   temp_profile.profile
134 # fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/number
135   file rho_profile.profile
136
137 thermo ${thermo} # 熱力学量の出力.
138 thermo_modify norm no # 示量的な熱力学量に調整.
139
140 run ${run} # 実行.

```

---

ソースコード B.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, yam1)
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 ポテンシャルの epsilon; ポテン
    シヤルの深さ.
24 variable sigma_pair equal 1.0 # LJ ポテンシャルの 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 ポテンシャル
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-${Rd} # LJ ポテンシャルの epsilon;
    ポテンシャルの深さ.
31 variable sigma_wall equal 0.5+${Rt} # LJ ポテンシャルの sigma; 衝突
    直径.

```

```

32 variable rc_wall equal 1.122462+${Ra} #
    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 hotlo equal -${gap} # 熱浴で温度の低い方の小さい方の直線.
41 variable hothi equal -${gap}+${trange} # 熱浴で温度の低い方の大きい
    方の直線.
42 variable coldlo equal ${Ay}-${gap}-${trange} # 熱浴で温度の高い方
    の小さい方の直線.
43 variable coldhi equal ${Ay}-${gap} # 熱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 # 縦長のとき
61 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 熱浴
    C の領域.
62 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 熱浴H の領域

```

```

63
64 # 各熱浴領域の温度を計算
65 compute Tcold all temp/region cold #
    c_Tcold で cold 熱浴領域の温度を取得.
66 compute Thot all temp/region hot #
    c_Tcold で cold 熱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 熱浴を用いた 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 # 縦長のとき
82 fix wallylo all wall/lj126 ylo EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall}
    ${rc_wall} units box pbc yes
83 fix wallyhi all wall/lj126 yhi EDGE ${epsilon_wall} ${sigma_wall}
    ${rc_wall} units box pbc yes
84
85 # langevin 熱浴
86 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.
87 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.
88 fix_modify hot temp Thot
89 fix_modify cold temp Tcold
90
91 # 重力場

```

```

92 fix Gravity all gravity ${g} vector 0 -1 0
93
94 # # 重力を熱流より先にかける時にコメントアウトを解除.
95 # run 40000000 # 重力のみでの平衡までの緩和時間
96 unfix hot # 熱浴H についての設定の解除.
97 unfix cold # 熱浴C についての設定の解除.
98
99 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.
100 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.
101 fix_modify hot temp Thot
102 fix_modify cold temp Tcold
103
104 # 重心計算 (Center of Mass)
105 compute CoM all com # c_CoM[1]でXg, c_CoM[2]でYg を取得.
106
107
108 # 出力コマンド
109 # lammppstrj
110 dump id all custom ${dump} PLACEHOLDER_outputtitle.lammppstrj id
    x y vx vy
111
112 # # 画像を生成するならコメントアウトを解除.
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])"" file PLACEHOLDER_outputtitle.yaml screen no
128
129  # # 一次元プロファイル(今は温度と密度だけ計算と出力)
130  # compute chunk all chunk/atom bin/1d y lower 3.0 units box
131  # fix temp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file
    temp_profile.profile
132  # fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/number
    file rho_profile.profile
133
134  thermo  ${thermo} # 熱力学量の出力.
135  thermo_modify norm no # 示量的な熱力学量に調整.
136
137  run  ${run} # 実行.

```

## B.2 実行ファイル

ソースコード B.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‘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 を実行し,生成された出力ファイルを指定のディレク
    トリに移動
12 - 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除
13
14 ## 手順
15

```

```

16 1. LAMMPS ファイルの特定とパラメータ設定
17 2. パラメータの範囲を定義
18 3. パラメータの組み合わせごとにLAMMPS を実行
19 4. 出力ファイルを指定ディレクトリに保存
20 5. 使用済みの仮LAMMPS ファイルを削除
21
22 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,出力
    ファイルの整理と保管を行います.
23 ===#
24
25 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
26 using Dates # 日付と時刻の取得に使用するパッケージ
27
28 # 実行するLAMMPS ファイルを特定
29 lammpsfile = glob("in.*")[1]
30
31 # パラメータの設定
32 chi = 1.265
33 remark_text = "test"
34 file_extensions = ["log", "yaml", "lammptest"] # 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) # 熱浴の温度差の範囲
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$(rho_value)_T$(
64         T_value)_dT$(dT_value)_Rd$(Rd_value)_Rt$(Rt_value)_Ra$(
65         Ra_value)_g$(g_value)_run$(run_value)"
66     outputtitle = "$(n)_$(remark_text)_$(parameter)"
67
68     # LAMMPS ファイルの内容を読み込み,パラメータを置換
69     template_script = read(lammpsfile, String)
70     mod_script = replace(template_script,
71         "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay_value),
72         "PLACEHOLDER_rho" => string(rho_value),
73         "PLACEHOLDER_T" => string(T_value),
74         "PLACEHOLDER_dT" => string(dT_value),
75         "PLACEHOLDER_g" => string(g_value),
76         "PLACEHOLDER_Rd" => string(Rd_value),
77         "PLACEHOLDER_Rt" => string(Rt_value),
78         "PLACEHOLDER_Ra" => string(Ra_value),
79         "PLACEHOLDER_run" => string(run_value),
80         "PLACEHOLDER_outputtitle" => string(outputtitle)
81     )
82
83     # 一意のファイル名を生成して仮ファイルを作成し,パラメータを書き込む
84     tempfile = "in.temp_script_$(n)"
85     fp = open(tempfile, "w")
86     write(fp, mod_script)
87     close(fp)
88
89     # LAMMPS を実行

```



```

88     run(`mpirun -n 4 lmp_mpi -log $(outputtitle).log -in $(
        tempfile)` )
89
90     # 出力ファイルを保存
91     for file_ext in file_extensions
92         files = glob("*.${file_ext}")
93         for file in files
94             outputpath = "../outputdir/${file_ext}dir"
95             mkpath(outputpath)
96             script = read(file, String)
97             fp = open(joinpath(outputpath, "${file}"), "w")
98
99             if file_ext == "log"
100                 println(fp, "${file}")
101             end
102
103             write(fp, script)
104             close(fp)
105             rm(file)
106         end
107     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 B.4: lammmps-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) # 熱浴の温度差の範囲
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     # 実験日時を記録
57     n = string(now())
58
59     # パラメータに基づいた出力ファイル名を生成
60     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)"
61     outputtitle = "$(n)_$(remark_text)_$(parameter)"
62
63     # LAMMPS ファイルの内容を読み込み、パラメータを置換
64     template_script = read(lammpsfile, String)
65     mod_script = replace(template_script,
66         "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay_value),
67         "PLACEHOLDER_rho" => string(rho_value),
68         "PLACEHOLDER_T" => string(T_value),
69         "PLACEHOLDER_dT" => string(dT_value),
70         "PLACEHOLDER_g" => string(g_value),
71         "PLACEHOLDER_Rd" => string(Rd_value),
72         "PLACEHOLDER_Rt" => string(Rt_value),
73         "PLACEHOLDER_Ra" => string(Ra_value),
74         "PLACEHOLDER_run" => string(run_value),
75         "PLACEHOLDER_outputtitle" => string(outputtitle)
76     )
77
78     # 一意のファイル名を生成して仮ファイルを作成し、パラメータを書き込む
79     tempfile = "in.temp_script_$(n)"

```

```

80     fp = open(tempfile, "w")
81     write(fp, mod_script)
82     close(fp)
83
84     # LAMMPS を実行
85     run('mysub -Q ness -C 4 -N gORa$(Ra_value) mpirun -n 4
86         lmp_mpi -log $(outputtitle).log -in $(tempfile)')
87 end

```

#### ソースコード B.5: lammps\_qsub\_out.jl

```

1  ===
2  # 出力ファイル保管
3
4  このJulia コードは,
5      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
6      ,適切なディレクトリに保存します.
7
8  ## 機能
9
10     - 'Glob' パッケージを使用してファイルマッチングを行う.
11     - 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,
12       指定のディレクトリに移動.
13     - 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除.
14
15 ## 手順
16
17     1. 出力ファイルを指定ディレクトリに保存.
18     2. 使用済みの仮LAMMPS ファイルを削除.
19
20 このコードは,出力ファイルの整理と保管を行います.
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
25 file_extensions = ["log", "yaml", "lammprj"] # 出力ファイルの拡張子

```

```

23
24 # 出力ファイルを保存
25 for file_ext in file_extensions
26     files = glob("*.${file_ext}")
27     for file in files
28         outputpath = "../outputdir/${file_ext}dir"
29         mkpath(outputpath)
30         script = read(file, String)
31         fp = open(joinpath(outputpath, "${file}"), "w")
32
33         if file_ext == "log"
34             println(fp, "${file}")
35         end
36
37         write(fp, script)
38         close(fp)
39         rm(file)
40     end
41 end
42
43 # 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除
44 files = glob("in.temp_*")
45 for file in files
46     rm(file)
47 end

```

## B.3 プロットファイル

ソースコード B.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 # 粒子-粒子LJ ポテンシャルのパラメータ.
17 epsilon = 1.0
18 sigma = 1.0
19 rc = 3.0 * sigma
20
21 # Rd, Rt, Ra の配列.
22 Rd_values = range(0.0, length=1)
23 Rt_values = range(0.0, 0.5, length=5)
24 Ra_values = range(1.877, length=1)
25
26 # プロット概形.
27 plot(xlabel="r/σ", ylabel="εcf^95/ε")
28 xlims!(0.2, 2.5)
29 ylims!(-1.5, 3.0)
30 title!("LJ-Potential vs. r")
31 xlabel!("r/σ")
32 ylabel!("εcf^95/ε")
33
34 # 粒子-粒子LJ ポテンシャルのプロット.
35 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)
48     # 壁-粒子LJ ポテンシャルのプロット.
49     plot!(x_values, y_values, label="Potential_wall;  $\epsilon_w = $(round(
50         epsilon_wall,digits=1)) \epsilon$ ,  $\sigma_w = $(round(sigma\_wall,digits
51         =1)) \sigma$ ,  $rc_w = $(round((2^{1/6}) + Ra,digits=2)) \sigma_w = $(round
52         (((2^{1/6}) + Ra)*sigma\_wall,digits=2)) \sigma$ ", linestyle=:dash
53     )
54 end
55
56 display(plot!())
57 # savefig("")
58
59 ccall(:jl_tty_set_mode, Int32, (Ptr{Cvoid}, Int32), stdin.handle
60     , true)
61 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.