

学士学位論文
重力と熱流をかけた流体のダイナミクスと壁の
濡れ性

茨城大学理学部理学科物理学コース
20S2305Y
山本 凜

2023 年度 (令和 5 年度)

目次

概要	4
はじめに	4
第 1 章 系の設定	6
1.1 ハミルトニアン	7
1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル	7
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約	8
1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル	10
1.2 熱浴領域	10
1.3 重力と熱流を導入	12
1.4 容器壁を系統的に比較	12
第 2 章 数値実験の結果	17
2.1 重力と熱流を同時にかける	17
2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける	22
2.3 重力のみをかける	25
2.4 熱流のみをかける	26
2.5 重力と熱流を同時にかける（時間 10 倍）	28
2.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）	30
第 3 章 ダイナミクスの特徴づけ	33
3.1 重心位置	33
3.2 リミットサイクル	36
第 4 章 本論文の重要な箇所のまとめ	42
謝辞	43
付録 A 分析画像	45

A.1	ヒストグラム	45
A.1.1	重力と熱流を同時にかける	45
A.1.2	重力を先にかけて, 熱流を後からかける	48
A.1.3	重力のみをかける	49
A.1.4	熱流のみをかける	50
A.1.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	51
A.1.6	重力を先にかけて, 熱流を後からかける (10 倍)	52
A.2	空間的な揺らぎ	52
A.2.1	重力と熱流を同時にかける	53
A.2.2	重力を先にかけて, 熱流を後からかける	55
A.2.3	重力のみをかける	56
A.2.4	熱流のみをかける	57
A.2.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	58
A.2.6	重力を先にかけて, 熱流を後からかける (10 倍)	59
A.3	サイクル	59
A.3.1	重力と熱流を同時にかける	59
A.3.2	重力を先にかけて, 熱流を後からかける	61
A.3.3	重力のみをかける	62
A.3.4	熱流のみをかける	63
A.3.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	64
A.3.6	重力を先にかけて, 熱流を後からかける (10 倍)	65
A.4	サイクル 3D	65
A.4.1	重力と熱流を同時にかける	65
A.4.2	重力を先にかけて, 熱流を後からかける	67
A.4.3	重力のみをかける	68
A.4.4	熱流のみをかける	69
A.4.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	70
A.4.6	重力を先にかけて, 熱流を後からかける (10 倍)	71
A.5	ヒートマップ	71
A.5.1	重力と熱流を同時にかける	72
A.5.2	重力を先にかけて, 熱流を後からかける	86
A.5.3	重力のみをかける	100
A.5.4	熱流のみをかける	114
A.5.5	重力と熱流を同時にかける (10 倍)	128
A.5.6	重力を先にかけて, 熱流を後からかける (10 倍)	129

付録 B	ソースコード	130
B.1	LAMMPS ファイル	130
B.2	実行ファイル	139
B.3	プロットファイル	145
参考文献		149

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 [1] 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。

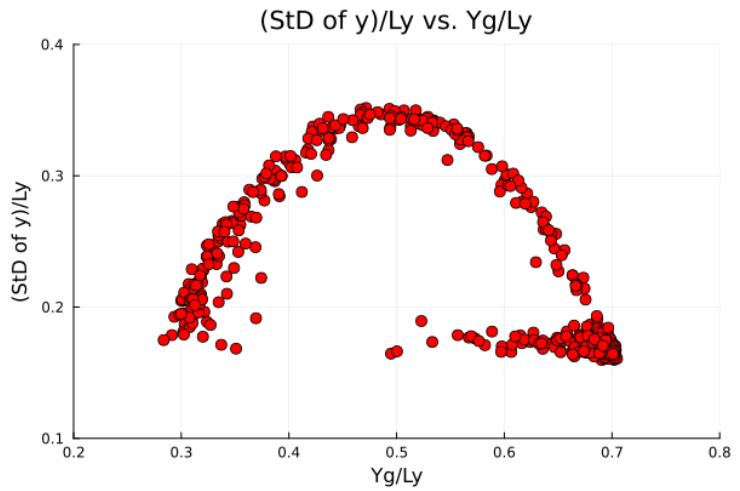


図 1

はじめに

本論執筆の最大の動機は、私が行った研究内容すべての引き継ぎである。私は卒業してしまうので、今後研究に着手する後輩に向けて細かな応答ができない。本論を読めば、誰でも研究内容を再現できるようになることを目指している。

1章にはこれから扱う系についての説明を記述している。この系を LAMMPS 上で再現するには、掲載している LAMMPS ファイルを実際に動かしてみればいい。

2章には実際に行った各シミュレーションの詳細な設定と、重心位置の推移のみを掲載した。なお付録にはすべてのシミュレーションから得られたデータを用いて分析した結果の画像を添付している。

3章では2章で得たデータを踏まえて、本論の主張の部分を記述している。

4章は本論のまとめである。2ページにまとめているが、詳細を知りたい場合は、1章から3章を参照するようにしてほしい。

この卒業論文を作成するにあたって、使用した TeX ファイルなど、研究発表に用いたスライドのデータ、研究手法などをまとめた Markdown ファイルは以下の URL から、または中川研が管理している SSD からダウンロードができるようになっている。(ただし実験データは中川研管理の SSD にしか保存していない。)

<https://github.com/m-agnet/Report.git>

<https://github.com/m-agnet/Presen.git>

<https://github.com/m-agnet/HowTo.git>

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

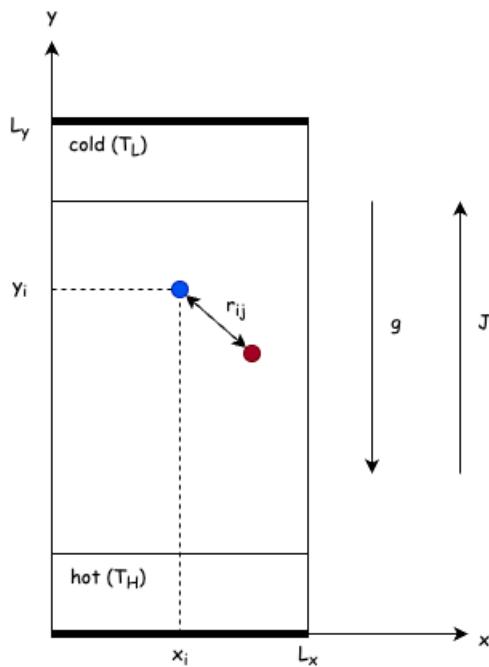
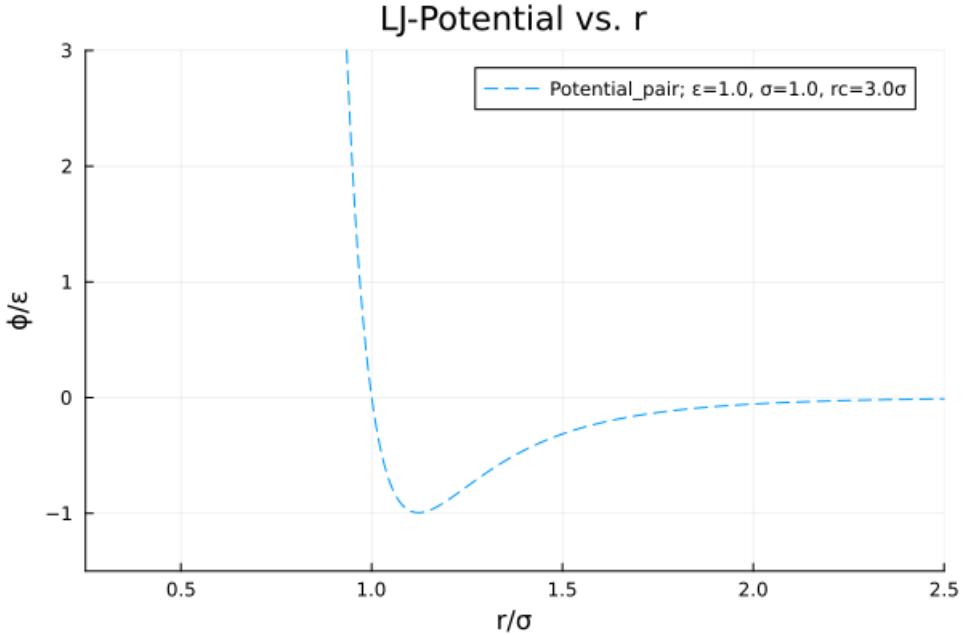


図 1.2: LJ ポテンシャル



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.

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

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。

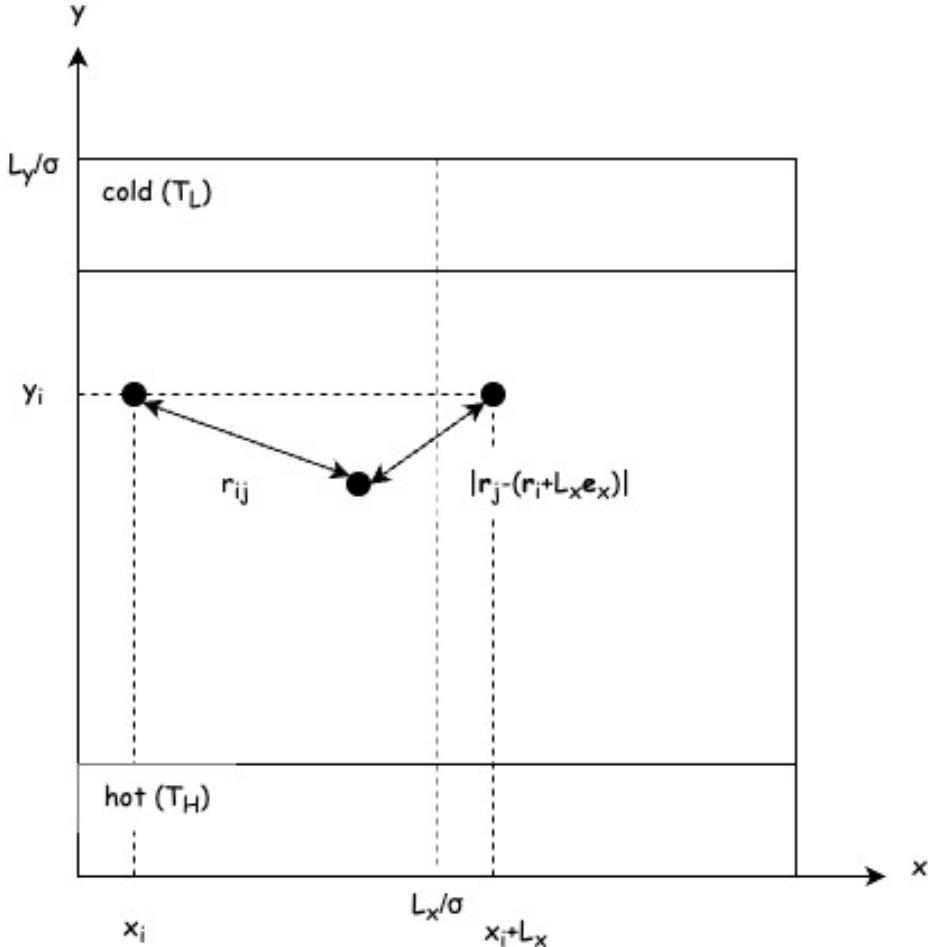
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約

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。[\[2\]](#)

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

$n_x = 0$ (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 1.3: 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. これまでのことを踏まえて, 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 熱浴領域

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, 热流を実装することにする.

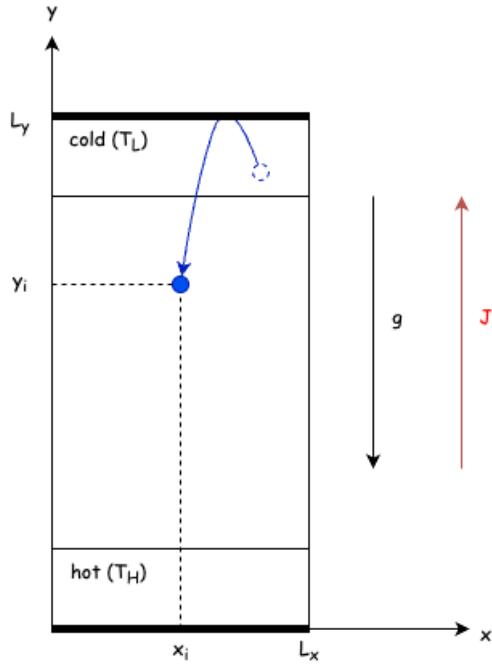


図 1.4: 热浴から飛び出る粒子の様子

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.

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

また、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.

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

1.3 重力と熱流を導入

1.2 節において, $T_H < T_L$ として, 熱流が流れるようにする.

当実験での系では, 熱流とともに重力ポテンシャルがかかっており, 重力と熱流のどちらも粒子密度の濃度勾配を生み出す効果をもつ. そこで両者の影響を比較するため, 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 $k_B\Delta T$ ($\Delta T \equiv T_H - T_L$) の比を χ として先行研究に倣って以下のように設定する.

[1]

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

1.4 容器壁を系統的に比較

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らるのかを示す。

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

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

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

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

である。

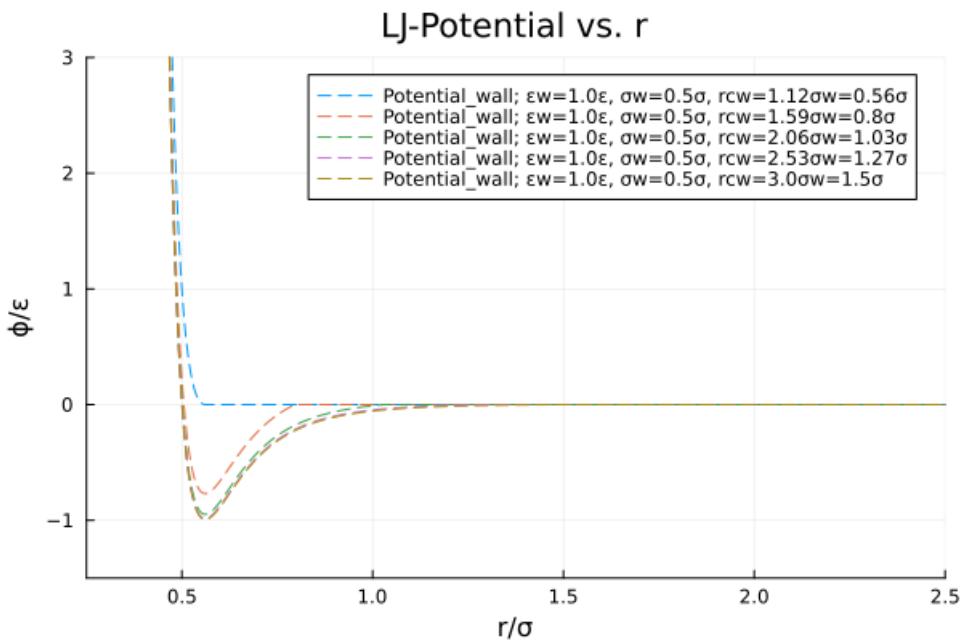


図 1.5: $R_t : 0.0$

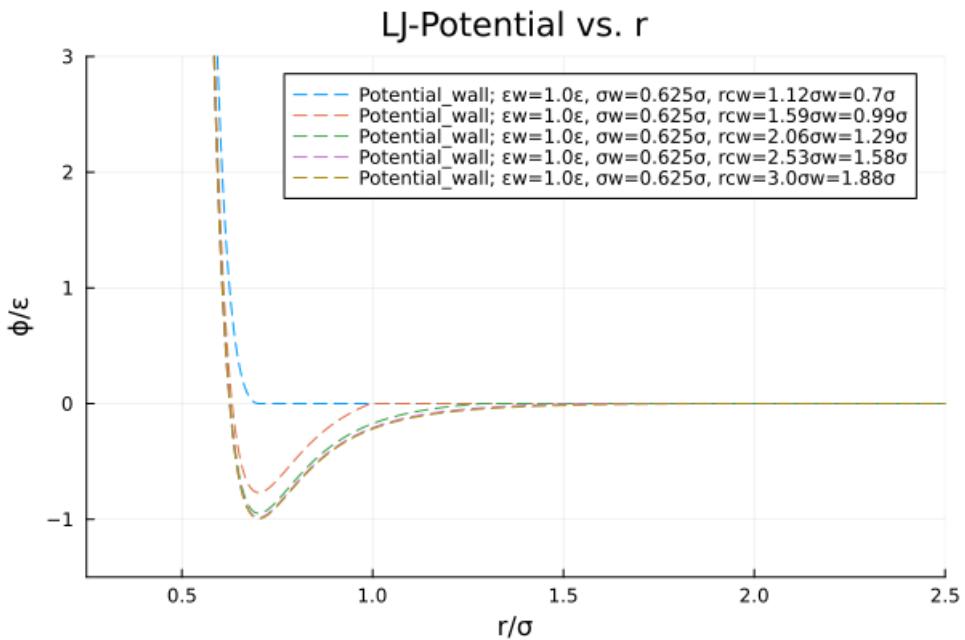


図 1.6: $R_t : 0.125$

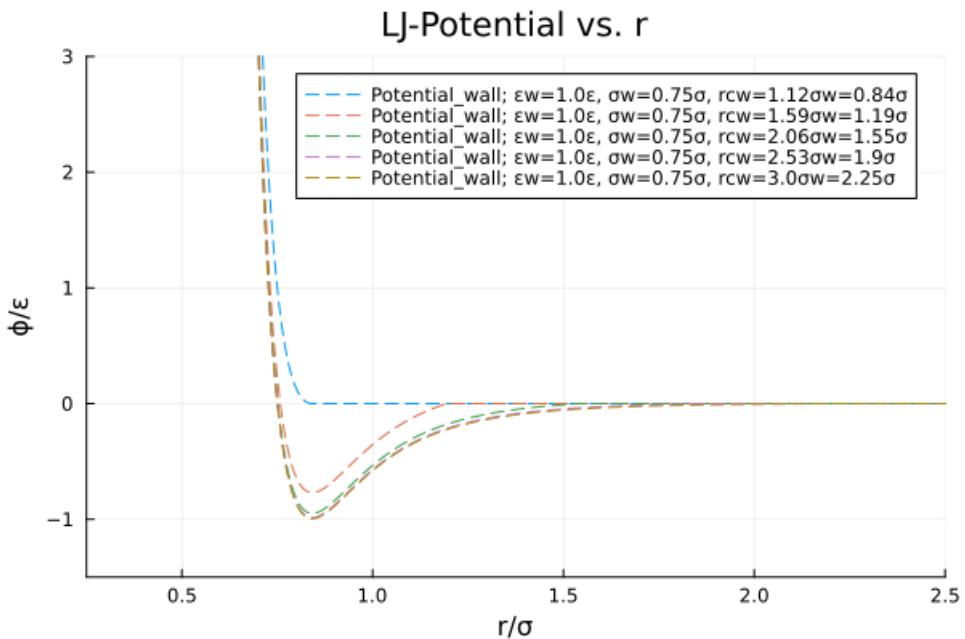


図 1.7: $R_t : 0.25$

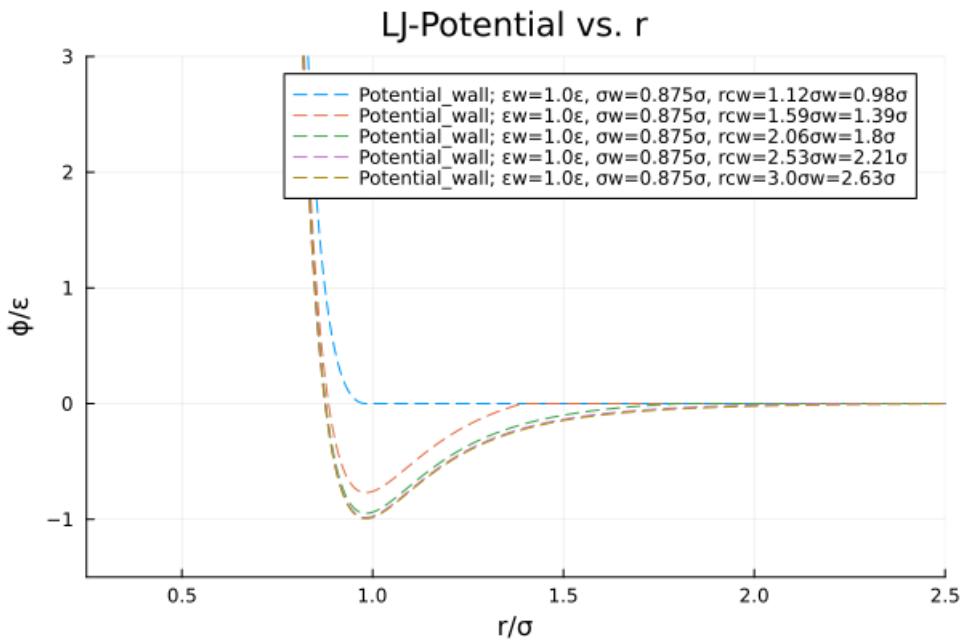


図 1.8: $R_t : 0.375$

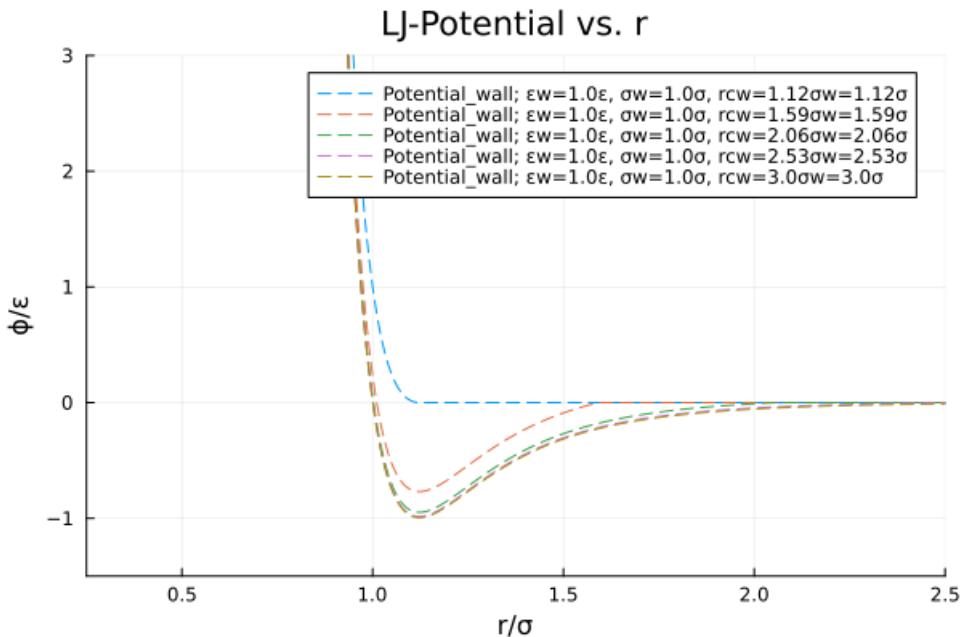


図 1.9: $R_t : 0.5$

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

- $k_{\text{B}}T/\varepsilon = 0.43$: 初期温度
- $k_{\text{B}}\Delta T/\varepsilon = 0.04$: 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 2.3, 2.5, 2.7, 2.9, 2.11, 2.13 では重心位置の時間発展を示している。

また、第 3 章で用いる t_i の時点がわかるように赤い直線を引くことにしている。紙面上では画像が小さくなってしまうので、各系ごとに拡大した画像を最初に示す。

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 1.10 のように、規則正しく並べられている。

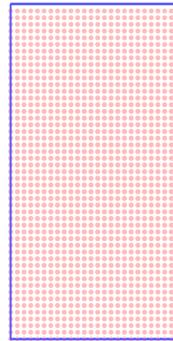


図 1.10: $N = 1250, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0$

第 2 章

数値実験の結果

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して、その結果得た各系の重心位置の推移を示す。

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

2.1 重力と熱流を同時にかける

まずは、重力と熱流を同じタイミングでかけたシミュレーションを用意した。粒子数については 1250 個、その他のパラメータについては先行研究 [1] を参考にした。

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

- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

図 2.1 で定常状態 ($t \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$) 時点でのスナップショットを見る.

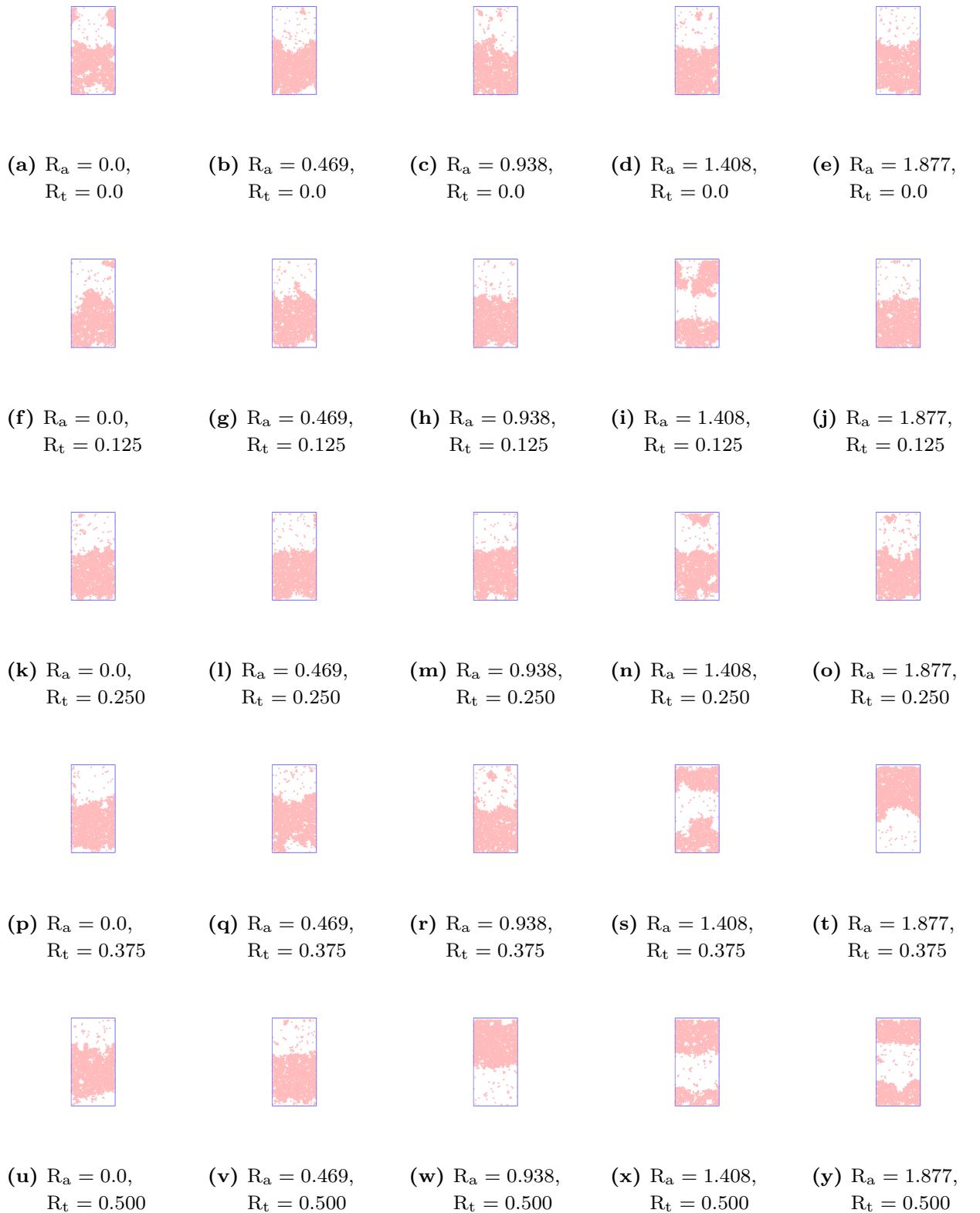


図 2.1: $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ のスナップショット. リンク先の動画は $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに描画.

スナップショットだけではダイナミクスがわからないので、次に図 2.3 で重心位置 Y_g (式 (2.1.0.1)) の時間変化の様子を見る。

$$Y_g \equiv \bar{y}_i = \frac{1}{N} \sum_i^N y_i \quad (2.1.0.1)$$

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、時系列プロットしている。

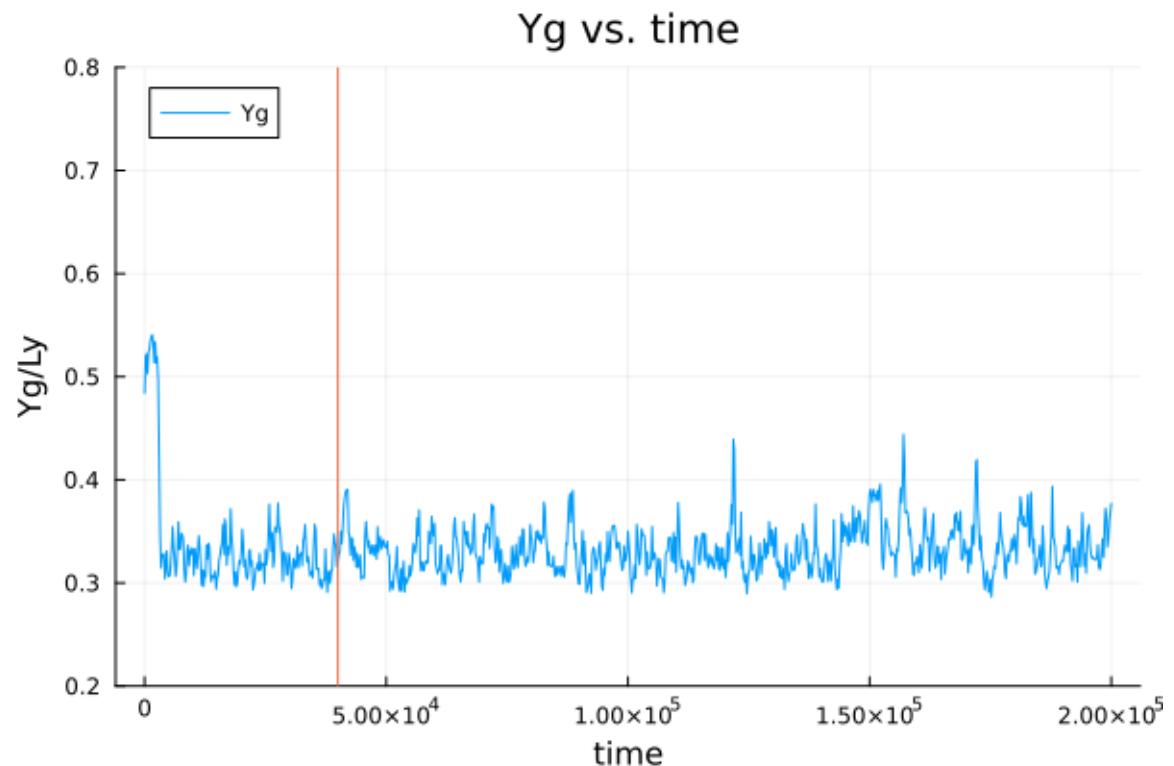


図 2.2: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

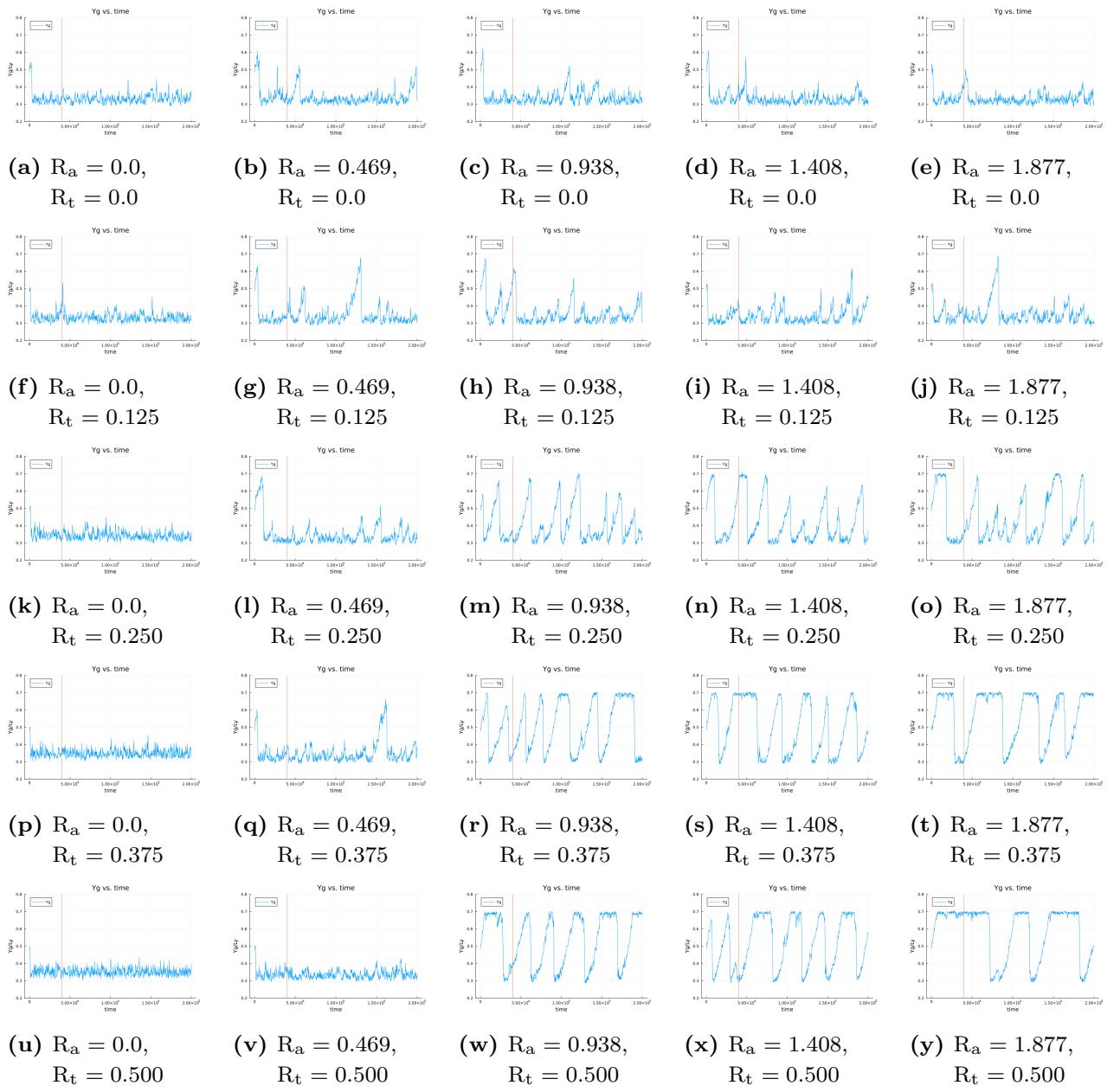


図 2.3: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

図 2.3 では、初期条件から $t_f\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ までの時間変化をプロットしており、赤い線の時刻あたりで定常状態に到達していると判断した。図 2.3 を見ると、引力幅 $R_a = 0.0$ の時は、ある定常状態のまわりのランダムなゆらぎが観測されているが、 $R_a \geq 0.469, R_t \geq 0.125$ の時は決してランダムとは言えない。 $R_a \geq 0.938$ かつ $R_t \geq 0.250$ の時には周期的なダイナミクスが発生していることが見てとれる。

2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

初期条件が異なる場合にダイナミクスが変化するかを調べるために、重力と熱流をかけるタイミングをずらしたシミュレーションを設定した。まず、 $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$ の時点まで重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかける。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 79.0$
- $L_y/\sigma \simeq 158.1$
- $k_B T/\varepsilon = 4.3$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$

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続ける。熱流をかけ始めてから、定常状態に至るまでの時間を 2.1 節と同様に $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^4$ として、重力をかけ始めてから数えて $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.4 \times 10^5$ の時点で定常状態に到達していると考える。

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

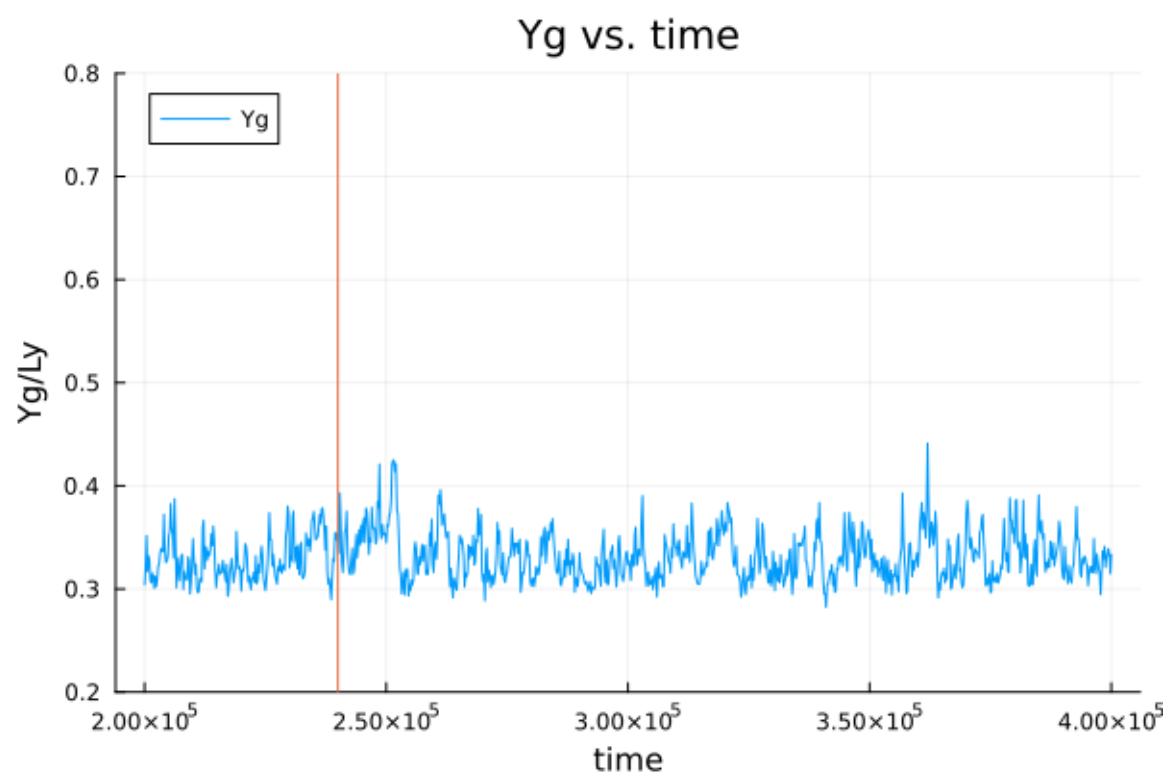


図 2.4: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

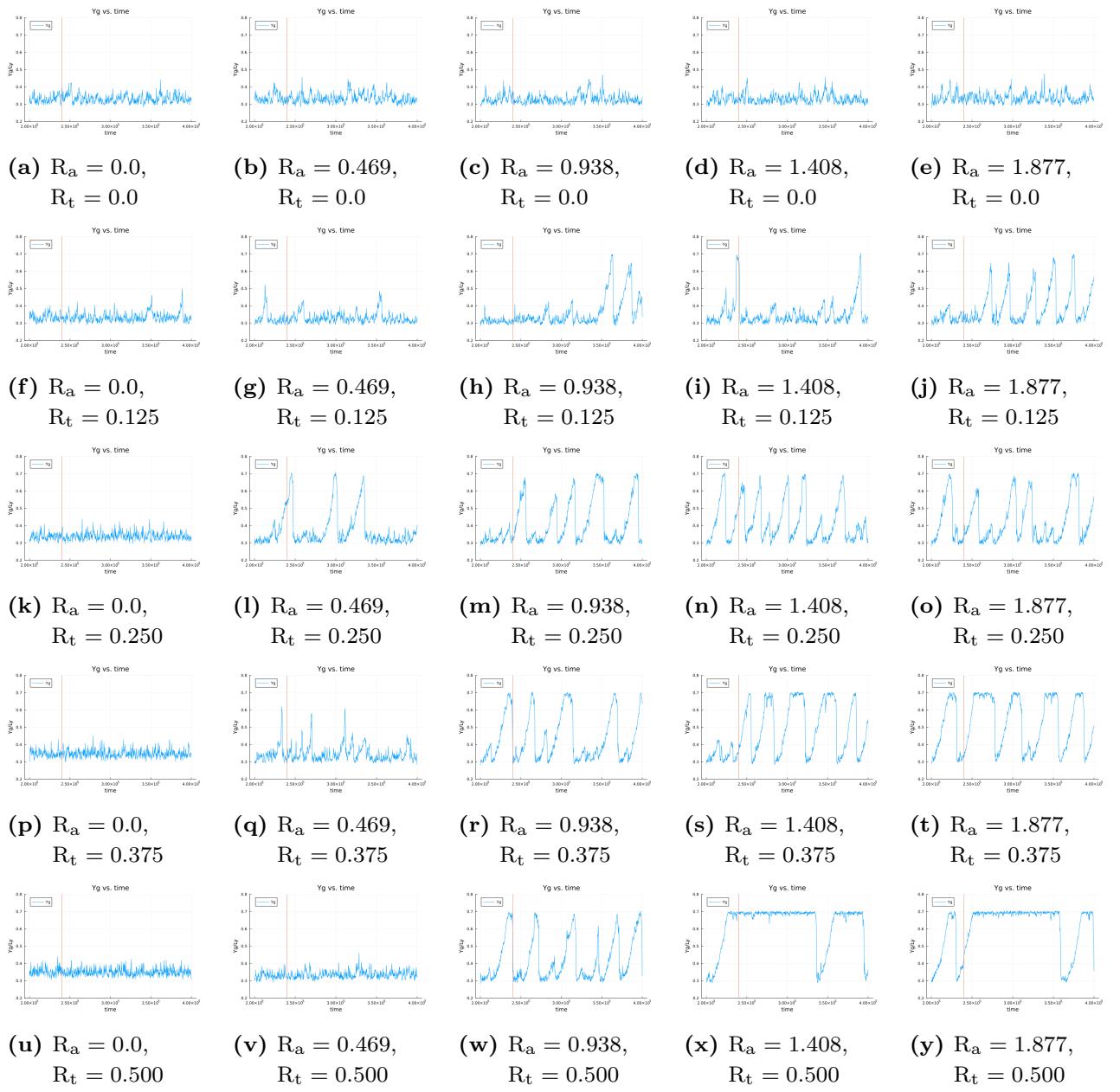


図 2.5: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.1 節と同様に、図 2.5 を見たとき、引力幅 $R_a = 0.0$ の時は、ある定常状態のまわりのランダムなゆらぎが観測されているが、 $R_a \geq 0.469, R_t \geq 0.125$ の時は決してランダムとは言えない。 $R_a \geq 0.938$ かつ $R_t \geq 0.250$ の時には周期的なダイナミクスが発生していることが見てとれる。

このことより、重力と熱流をかけるタイミングをずらしたとしてもダイナミクスは大きく変わらないことが分かる。

図 2.3, 2.5 の (x), (y) に注目すると、2.1 節でのそれと比べて、上壁に張りついている時間が長い様子が見てとれる。周期的なダイナミクスが発生しているのかどう

か, 2.5 節では, 2.5 の 10 倍の時間をとって実験をする.

2.3 重力のみをかける

重力のみをかけた系, 熱流のみをかけた系を考えると, それぞれ流体系は壁の下部, 上部で安定することが予想できたが, 実際に実験で確かめた.

まず, 重力のみをかけた系を考える.

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

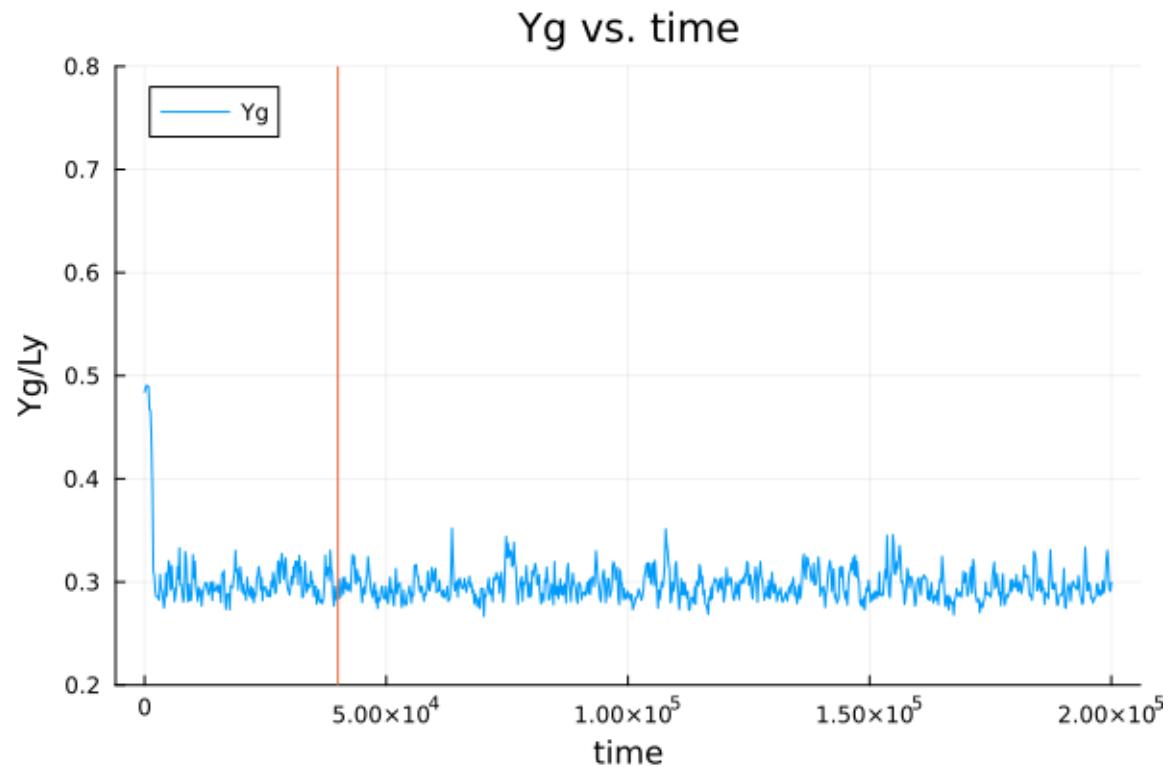


図 2.6: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

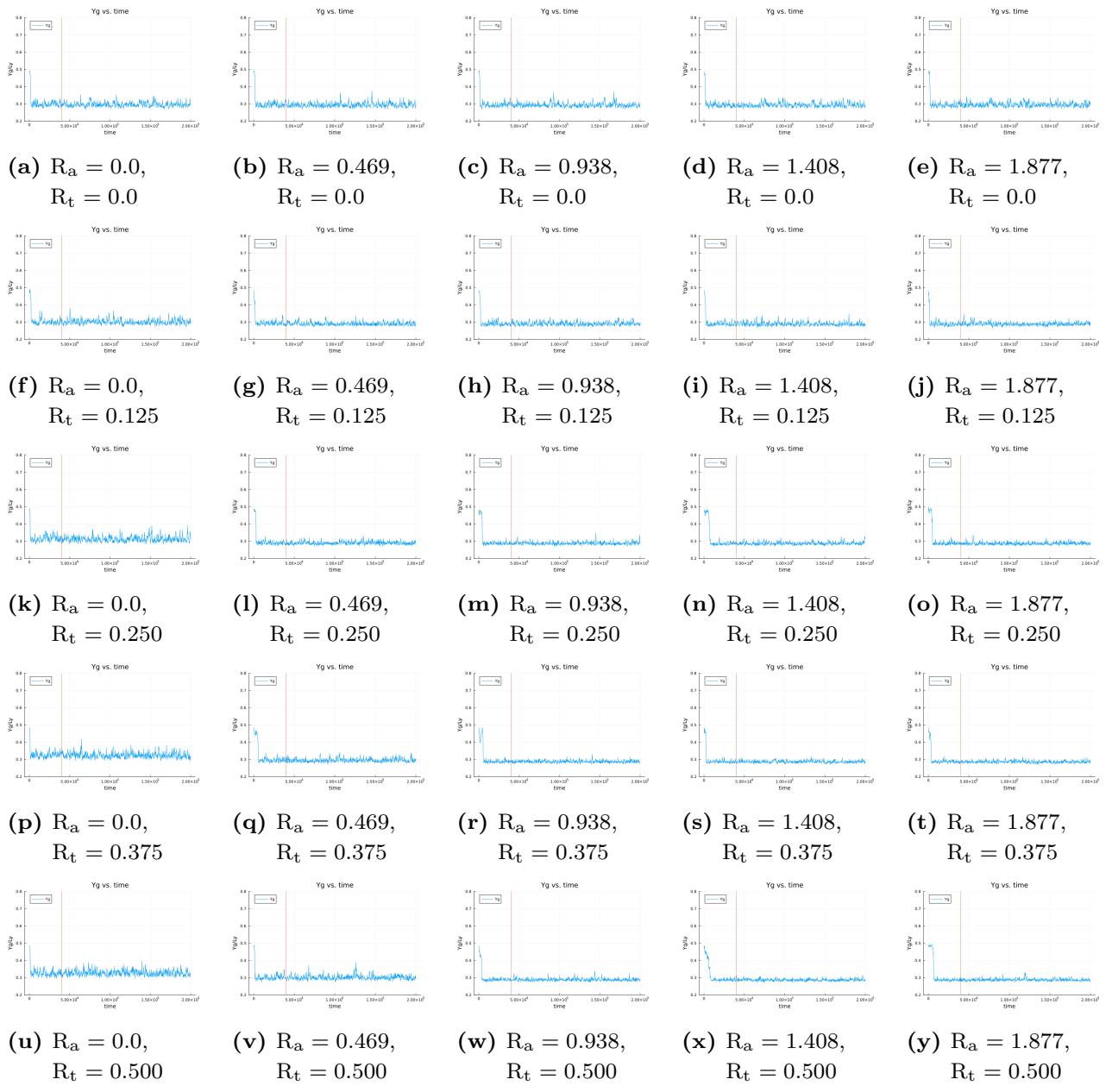


図 2.7: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

この重心位置の推移から、重心のみをかけた系では予想通り流体系が壁の下部で安定することが確認できた。

2.4 熱流のみをかける

次に、熱流のみをかけた系で実験をした。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$

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

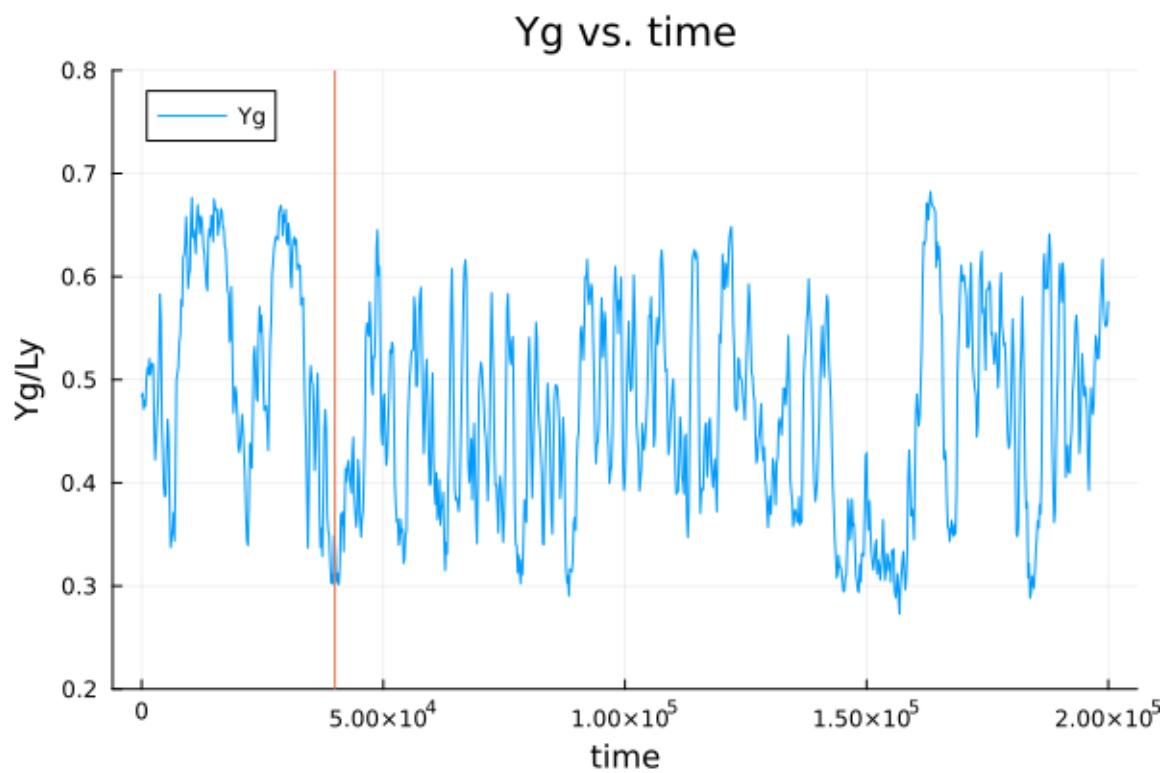


図 2.8: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

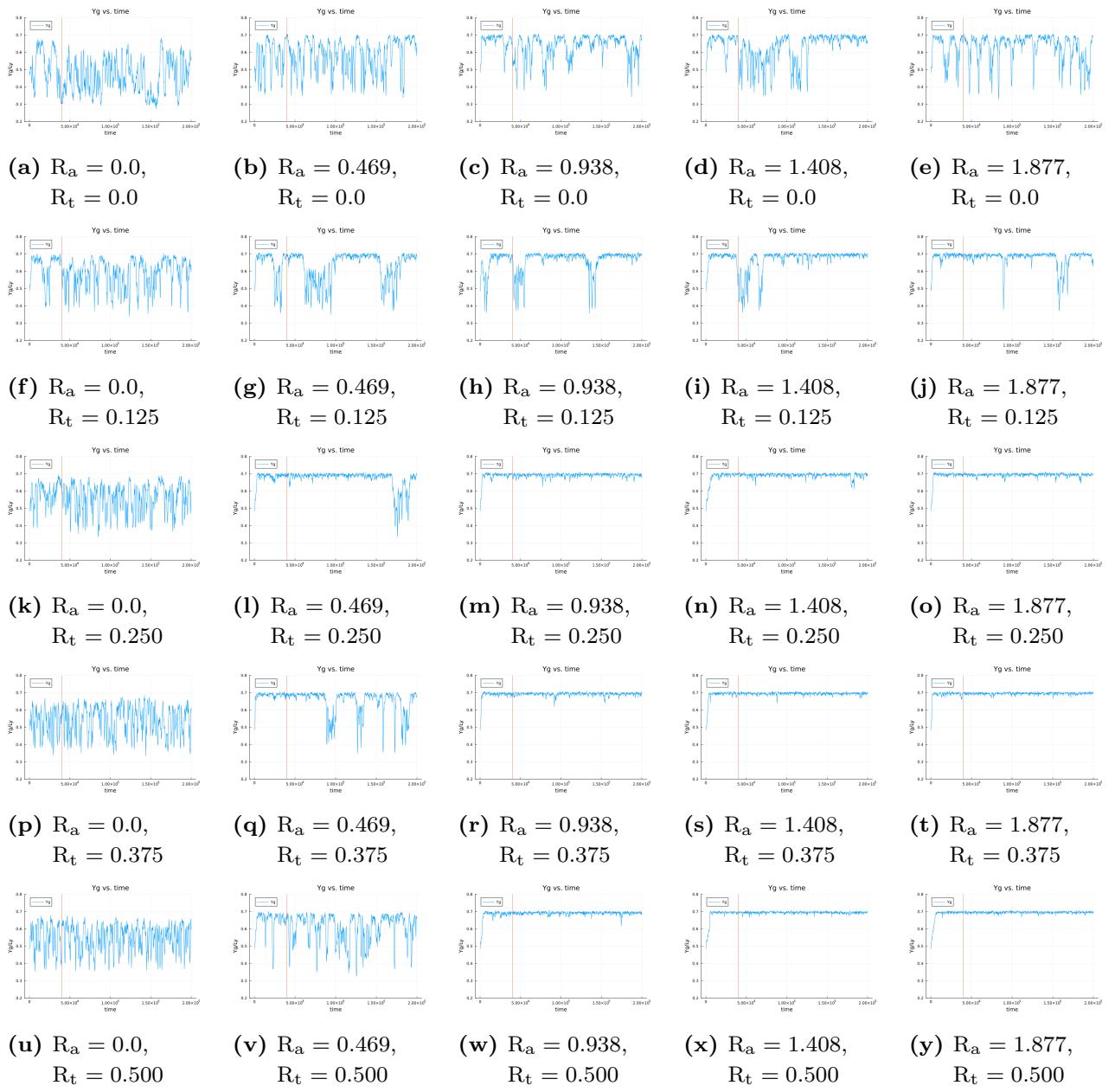


図 2.9: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.5 重力と熱流を同時にかける (時間 10 倍)

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$
- $L_y/\sigma \simeq 79.0$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$

- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^6$

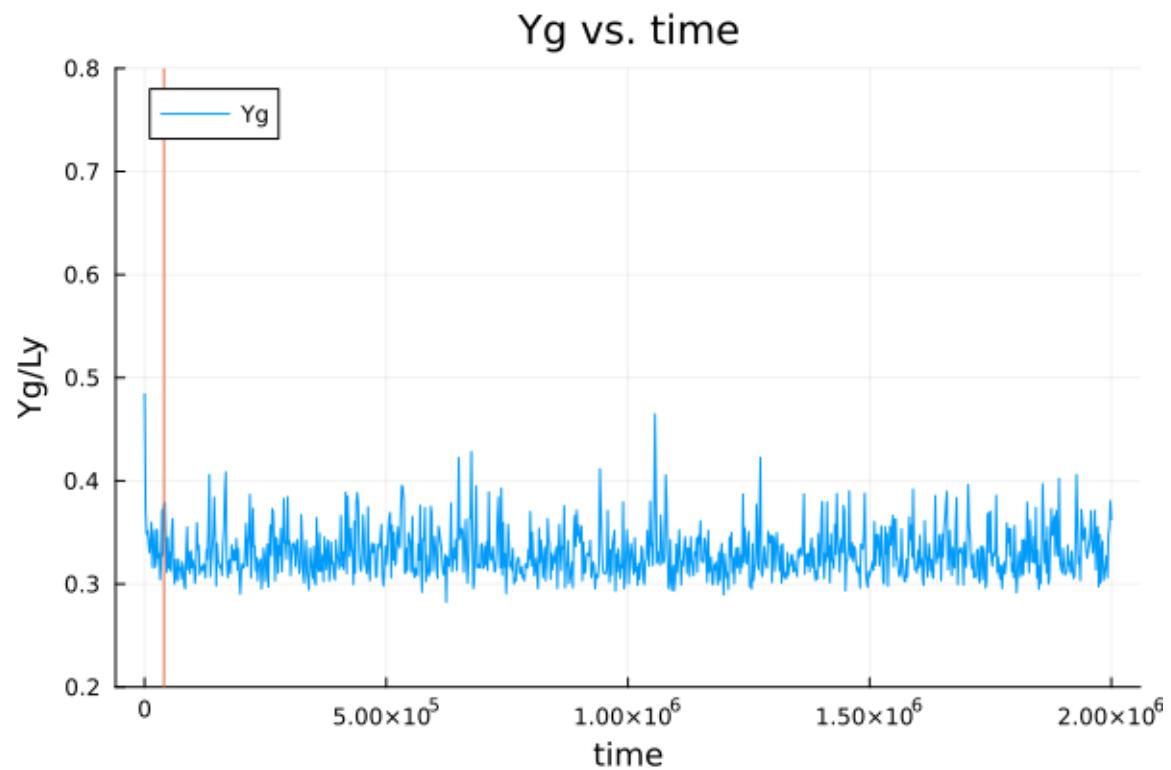


図 2.10: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

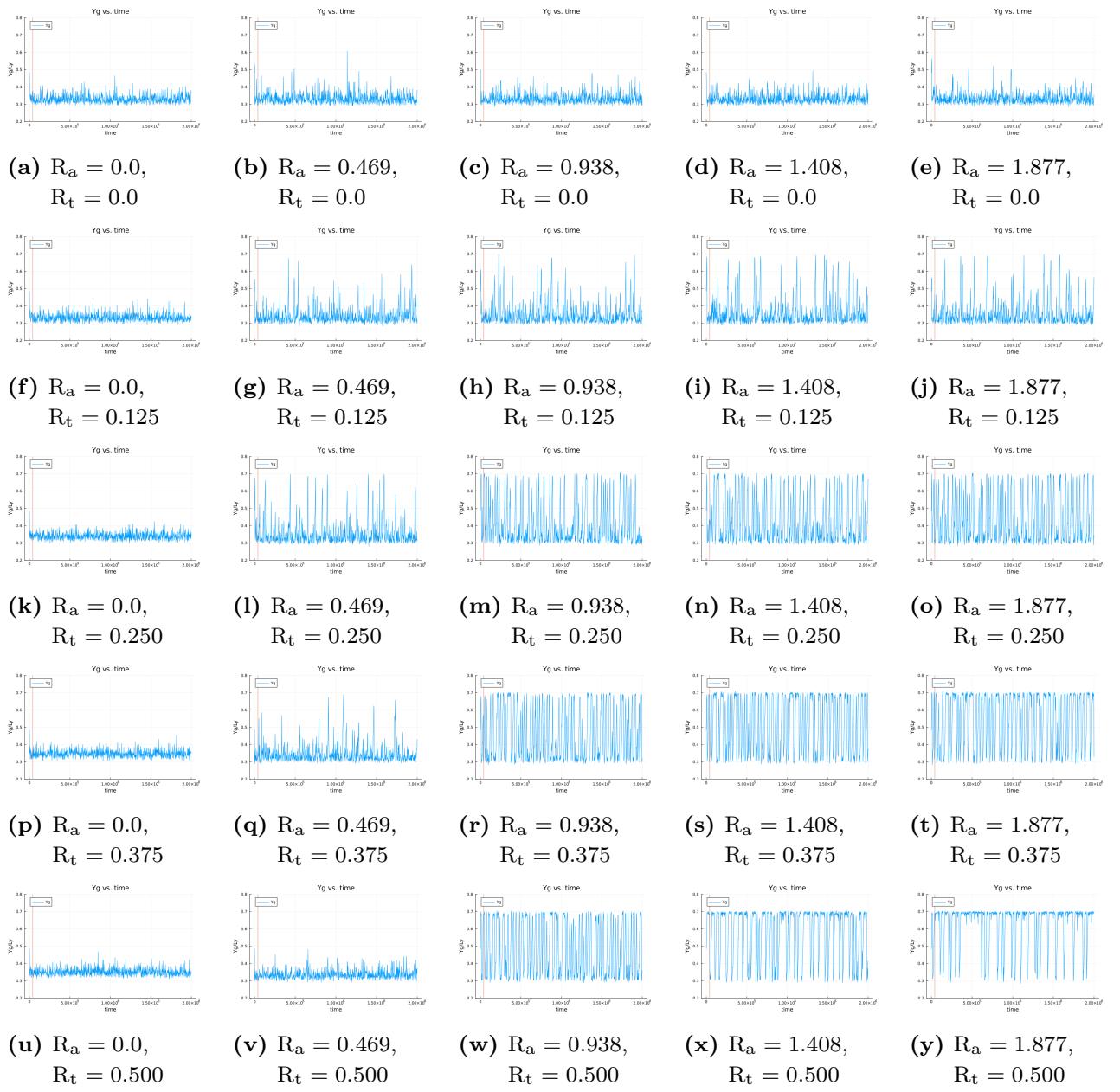


図 2.11: $t_i = 0$, $t_f = 2.0 \times 10^6$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

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。

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 39.5$

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

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。

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

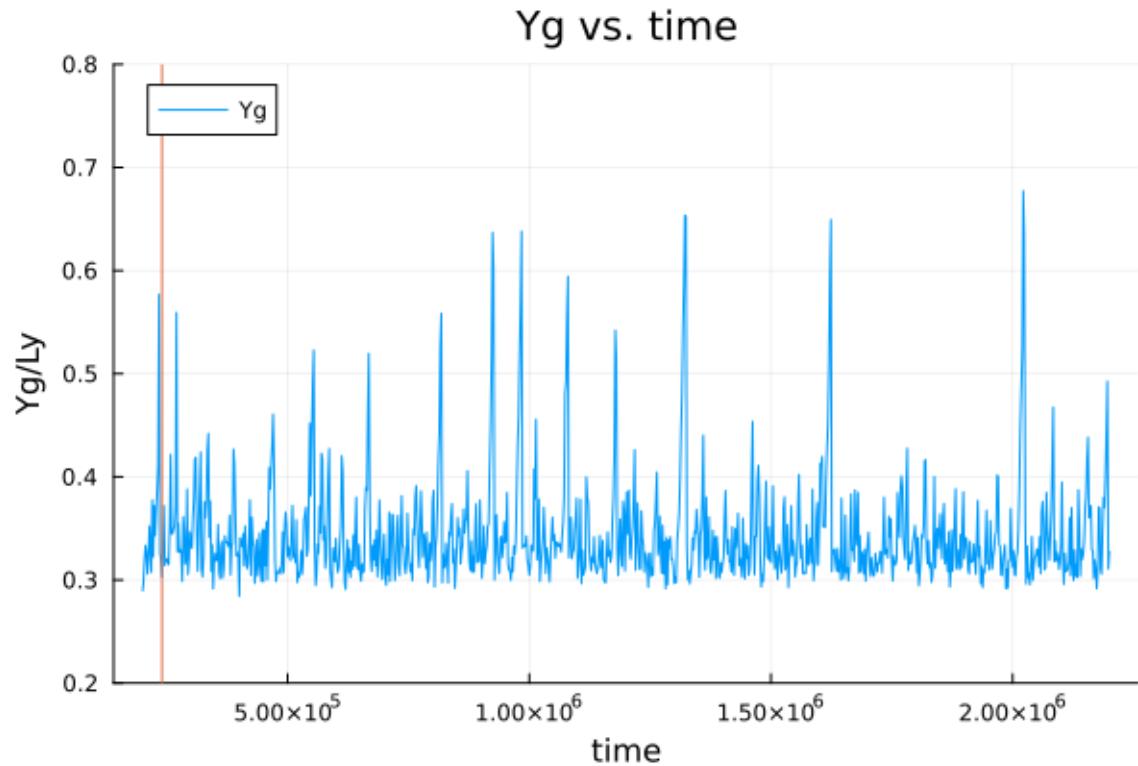


図 2.12: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

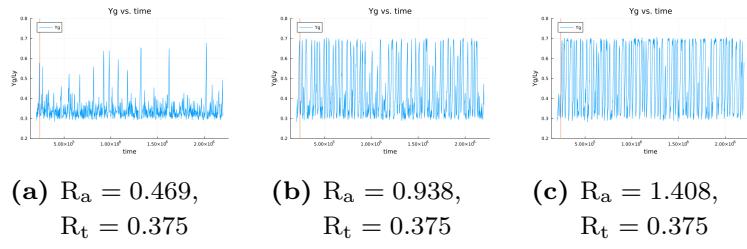


図 2.13: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 2.2 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

第 3 章

ダイナミクスの特徴づけ

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、ダイナミクスについて考える。適宜文脈に則した画像を添付するが、入りきらない部分は付録 A に収録する。

また、以降の議論は定常状態であるとみなした $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^4$ 以降のデータを用いて行う。

3.1 重心位置

重心位置の標準偏差 $\sigma(Y_g)$ 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 $\sigma_y(t)$ (式 (3.2.0.1)) とは定義から見ても分かるとおり異なる量である。

2.1 節(重力と熱流を同時にかける)のシミュレーションで得たデータを用いて、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す。

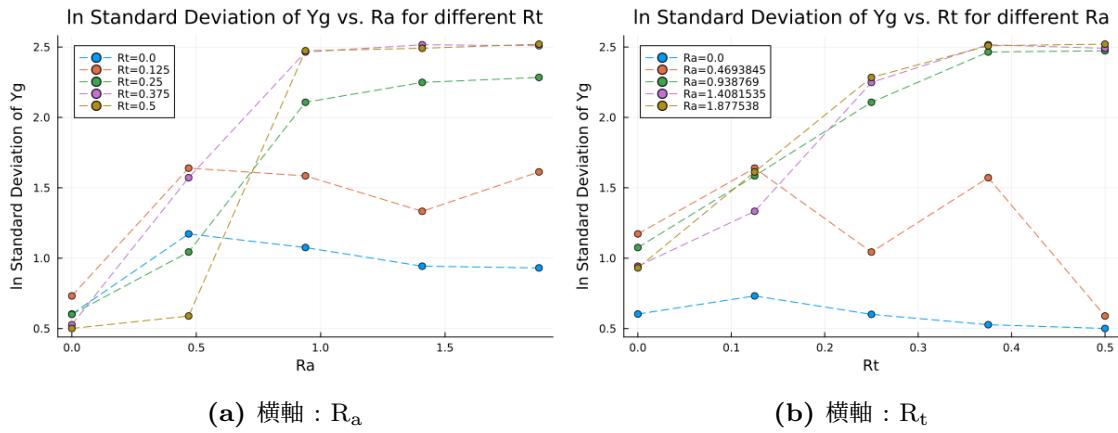


図 3.1: 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

図 2.3v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 2.3w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間をより詳しく見る。

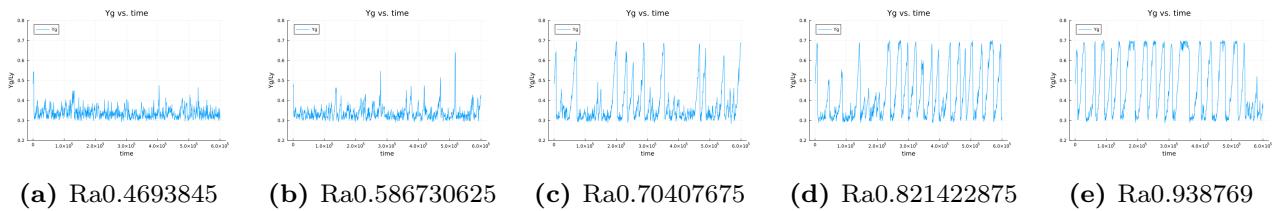


図 3.2: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^5, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 600$ ごとにプロット。

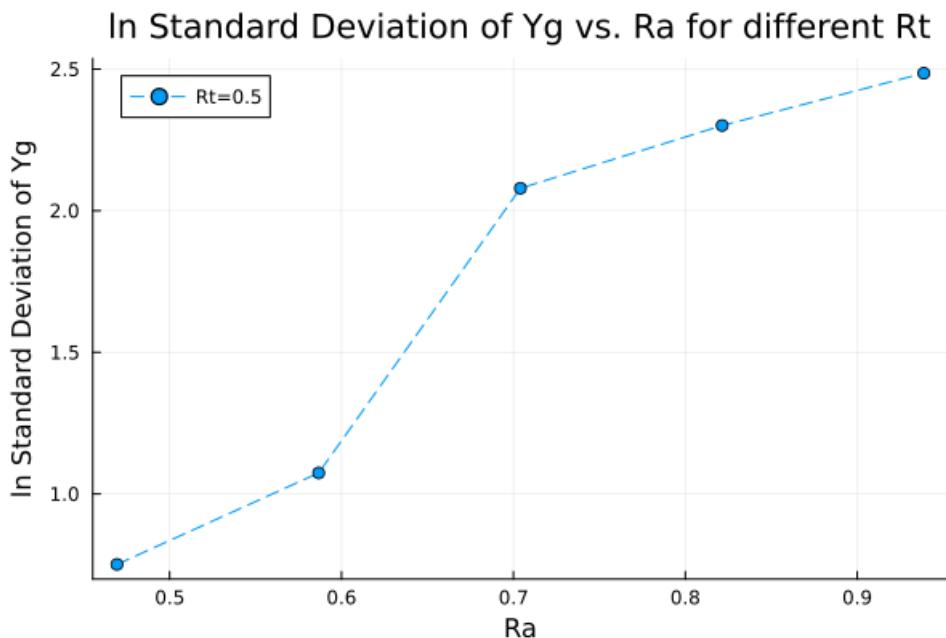


図 3.3: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

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.

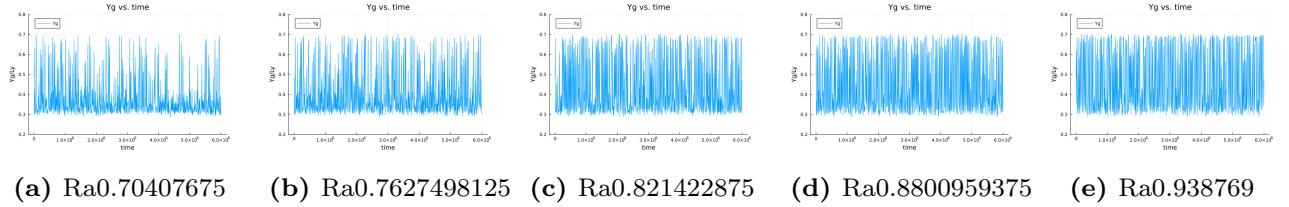


図 3.4: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 6000$ ごとにプロット.

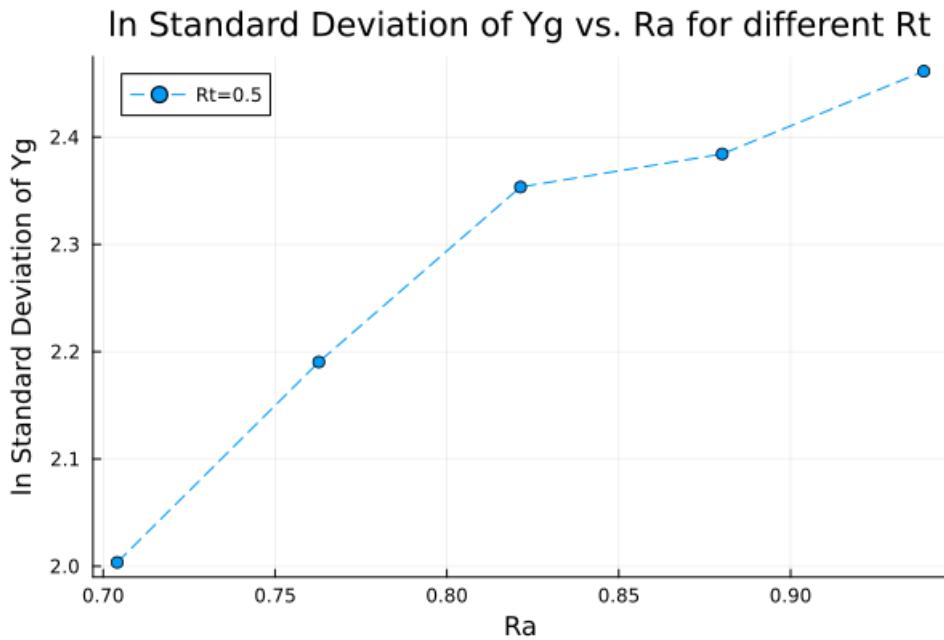


図 3.5: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

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 2.3v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 2.3w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ 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。

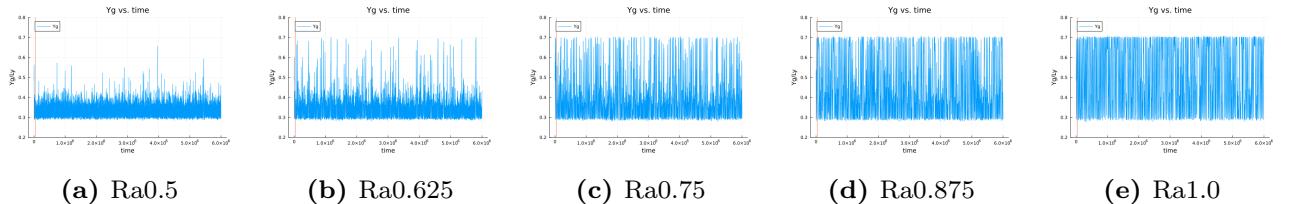


図 3.6: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 50$ ごとにプロット.

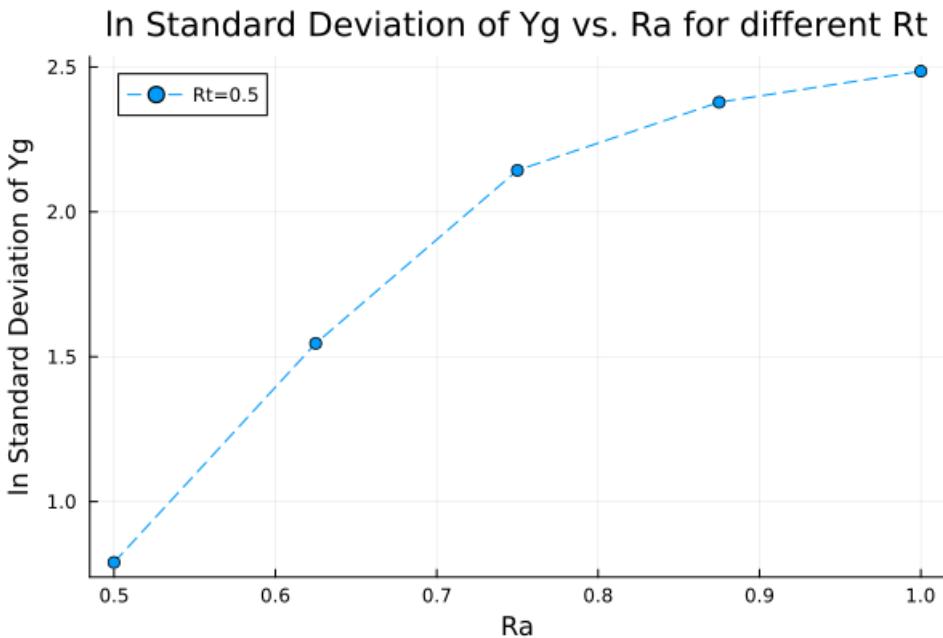


図 3.7: 横軸: R_a , 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

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大きくなると言うことがわかる.

3.2 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 [3] と呼ばれる振動の形態がある. 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 $\sigma_y(t)$ を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} \sigma_y(t) &\equiv \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - \bar{y}_i(t))^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2} \end{aligned} \quad (3.2.0.1)$$

2.5 節 (重力と熱流を同時にかける (時間 10 倍)) で得たデータを用いて, 重心位置と, 流体系の空間的なばらつきの時系列プロットをそれぞれ並べる.

まず, R_a を固定して, R_t のみを変えた系での各物理量の時系列プロットを示す.

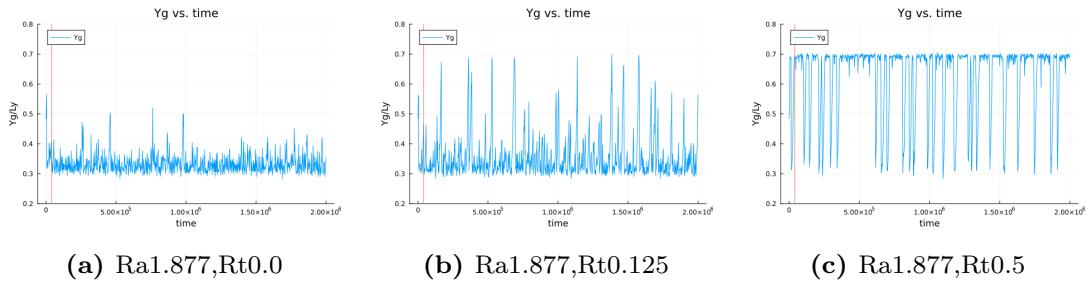


図 3.8: 重心位置の時系列プロット, $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

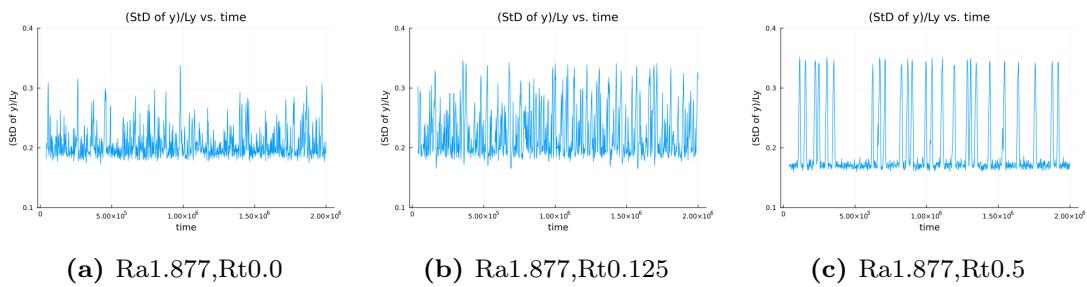


図 3.9: 流体系の空間的なばらつきの時系列プロット, $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

次に, R_t を固定して, R_a のみを変えた系での各物理量の時系列プロットを示す.

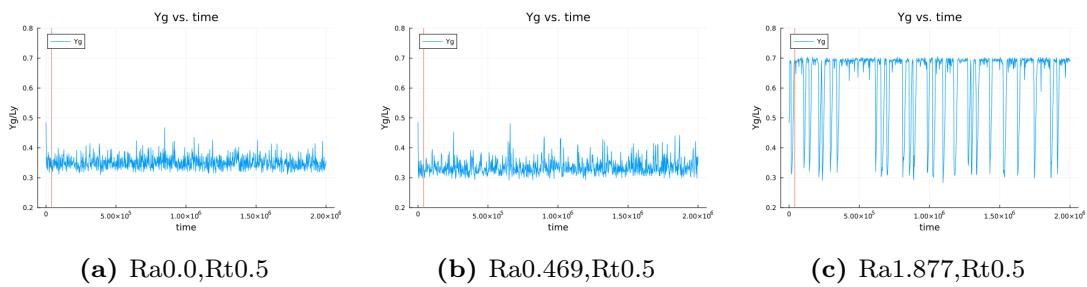


図 3.10: 重心位置の時系列プロット, $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

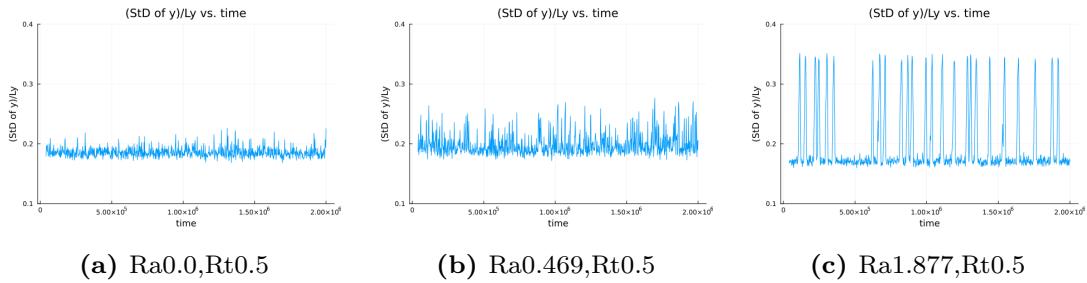


図 3.11: 流体系の空間的なばらつきの時系列プロット, $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

これらを踏まえて, 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それぞれ並べる.

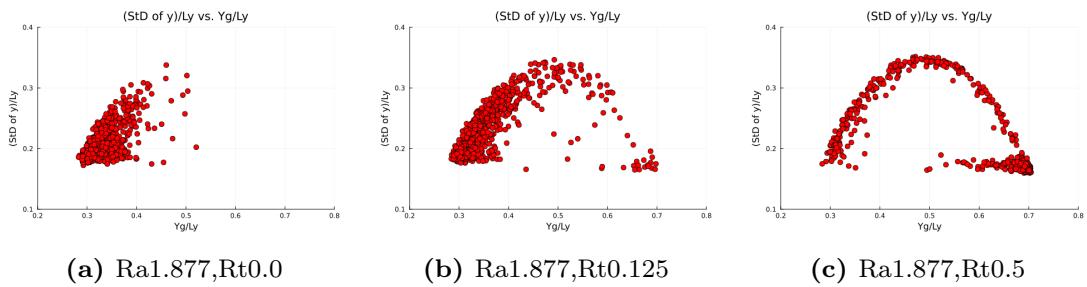


図 3.12: リミットサイクル, Ra 固定 $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

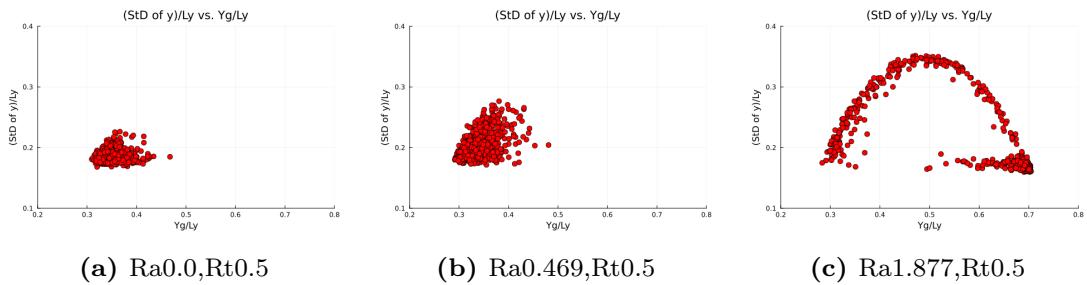
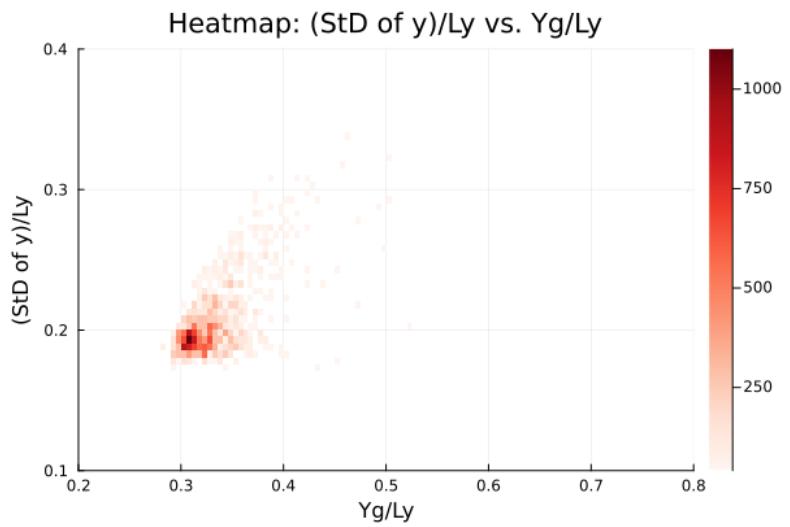


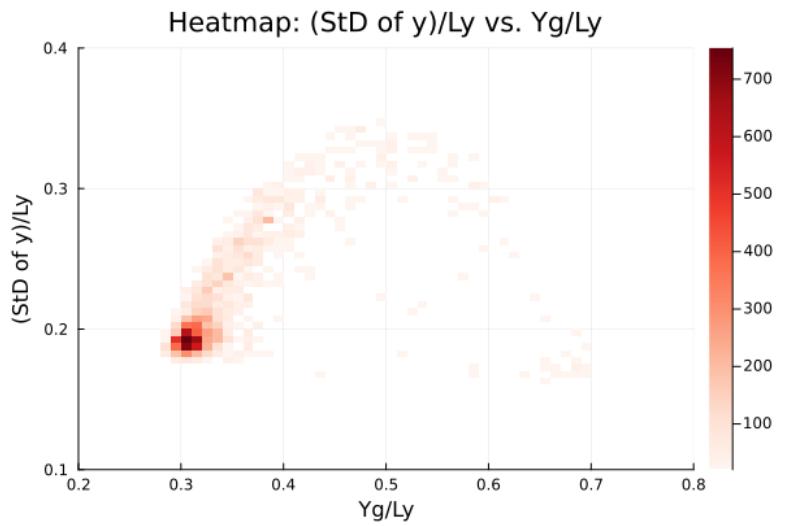
図 3.12, 3.13 を見ると, 壁の濡れ性を強くするとサイクルが閉じ, このとき非定常で周期的なダイナミクスが現れているということがわかる.

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え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, 液体の落下のそれよりも遅いことも分かる.

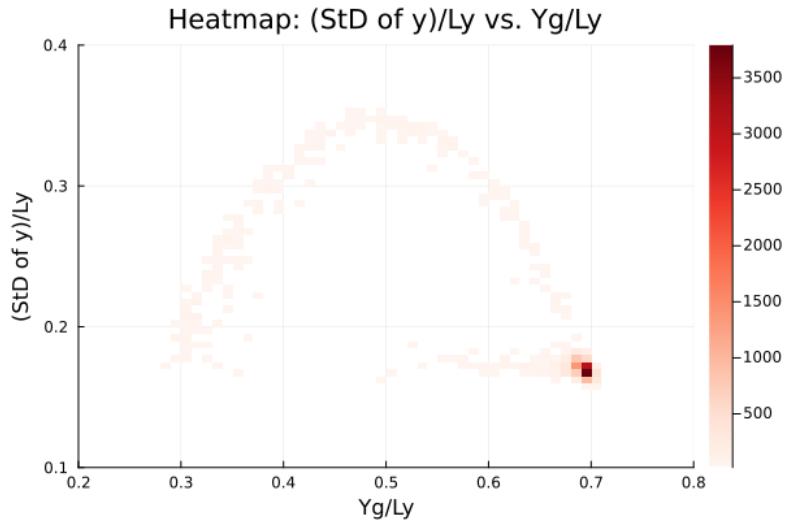
リミットサイクルのプロットが多く密集している箇所が濃くなるようにヒートマップを作ると以下のように、系によって流体系が一定の位置に長く留まることが分かりやすくなる。



(a) Ra1.877,Rt0.0

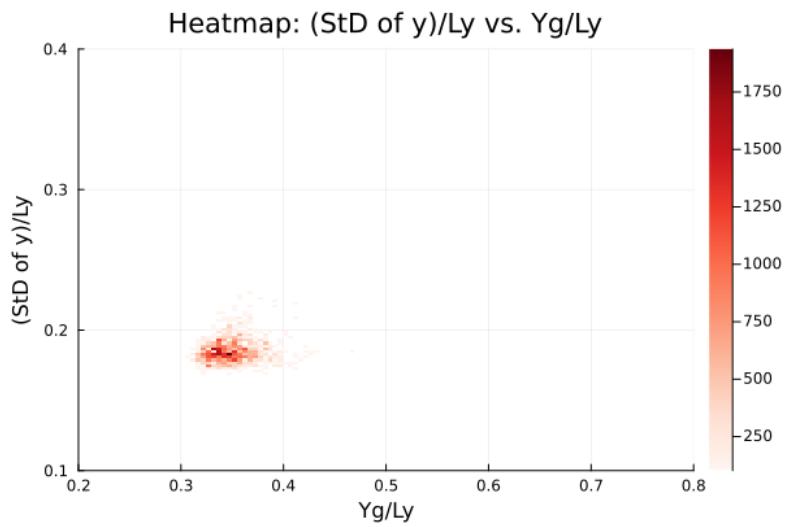


(b) Ra1.877,Rt0.125

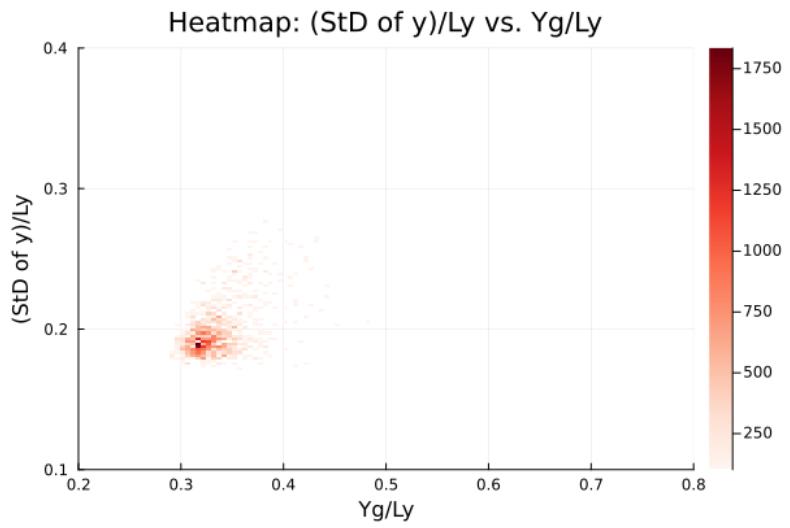


(c) Ra1.877,Rt0.5

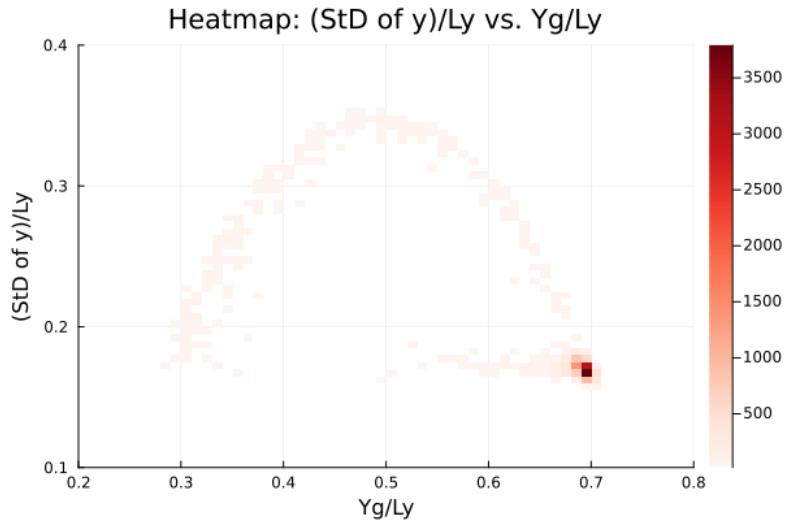
図 3.14: ヒートマップ, Ra 固定



(a) Ra0.0,Rt0.5



(b) Ra0.469,Rt0.5



(c) Ra1.877,Rt0.5

図 3.15: ヒートマップ, Rt 固定

第 4 章

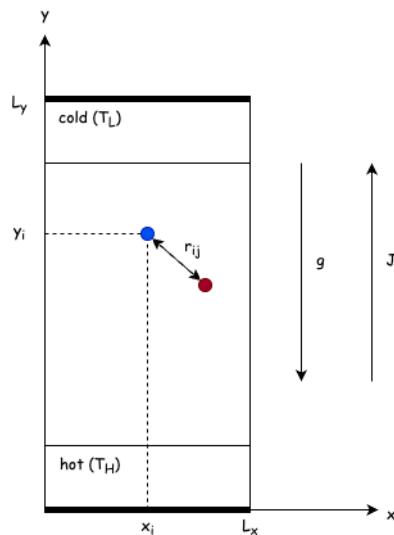
本論文の重要な箇所のまとめ

系の上下両端のポテンシャルエネルギー差と運動エネルギー差の比を

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

として重力と熱流を設定し、

図 4.1: 系の概略図



ハミルトニアンを

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

とした (詳しくは 1 章を参照) 系において、

壁の親水性が高いほど、流体系の重心位置は激しく変化し、周期的なダイナミクスが現れるということがわかった。(詳しくは 3.1 節を参照。)

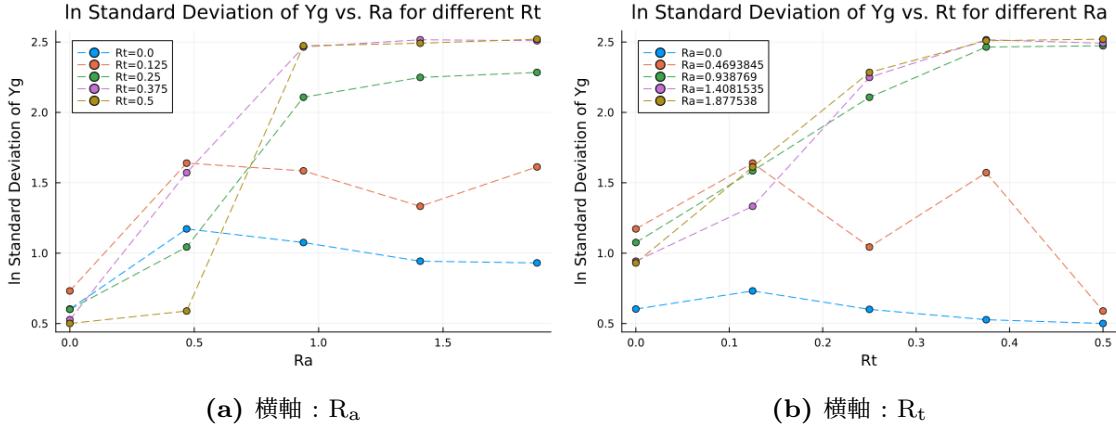


図 4.2: 縦軸: 重心位置の標準偏差の対数プロット

また、壁の濡れ性が大きく、ダイナミクスが現れるような流体系の重心位置と空間的なばらつきの相空間上での軌道は閉じることがわかった。(詳しくは 3.2 節を参照。)

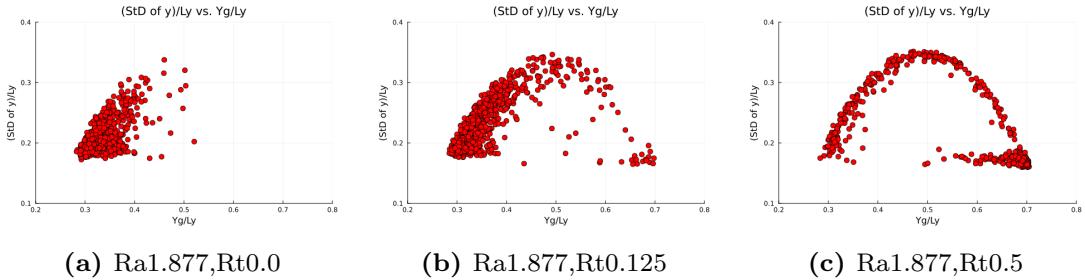


図 4.3: リミットサイクル, Ra 固定 $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット。

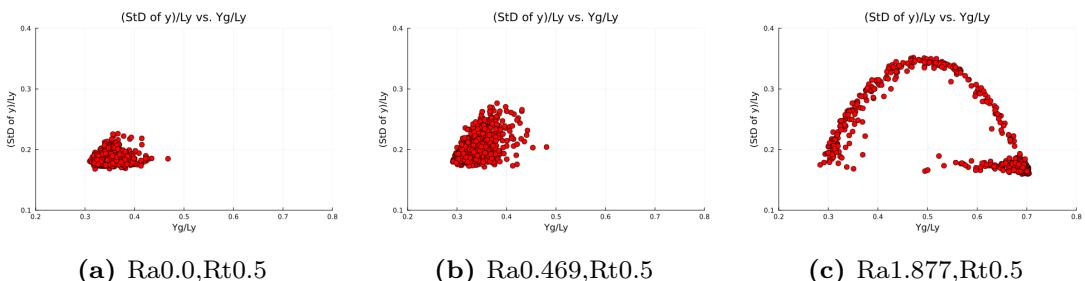


図 4.4: リミットサイクル, Rt 固定, $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット。

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く, 私の目標です. 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

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が、紙面上では各画像が小さくなってしまうため、pdf ファイルで閲覧することをオススメする。縦軸、横軸が何を表しているのかが分かるように各画像群の中から 1 枚を選択して、大きく表示したものも掲載する。(ヒートマップだけは最初に全体図を示してから、各画像を拡大したものも載せている。)

A.1 ヒストグラム

A.1.1 重力と熱流を同時にかける

図 2.3 の結果をそれぞれ正規化したヒストグラムにして表す。ビン数は共通で 50 本である。

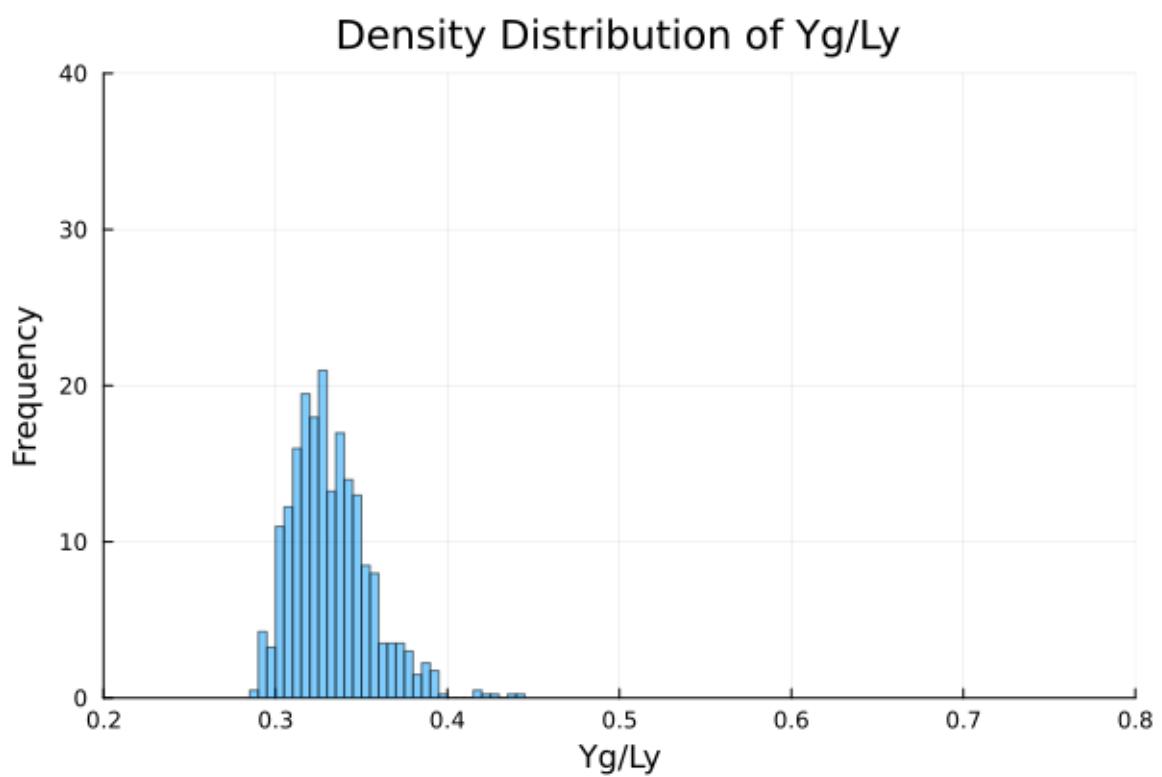


図 A.1: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

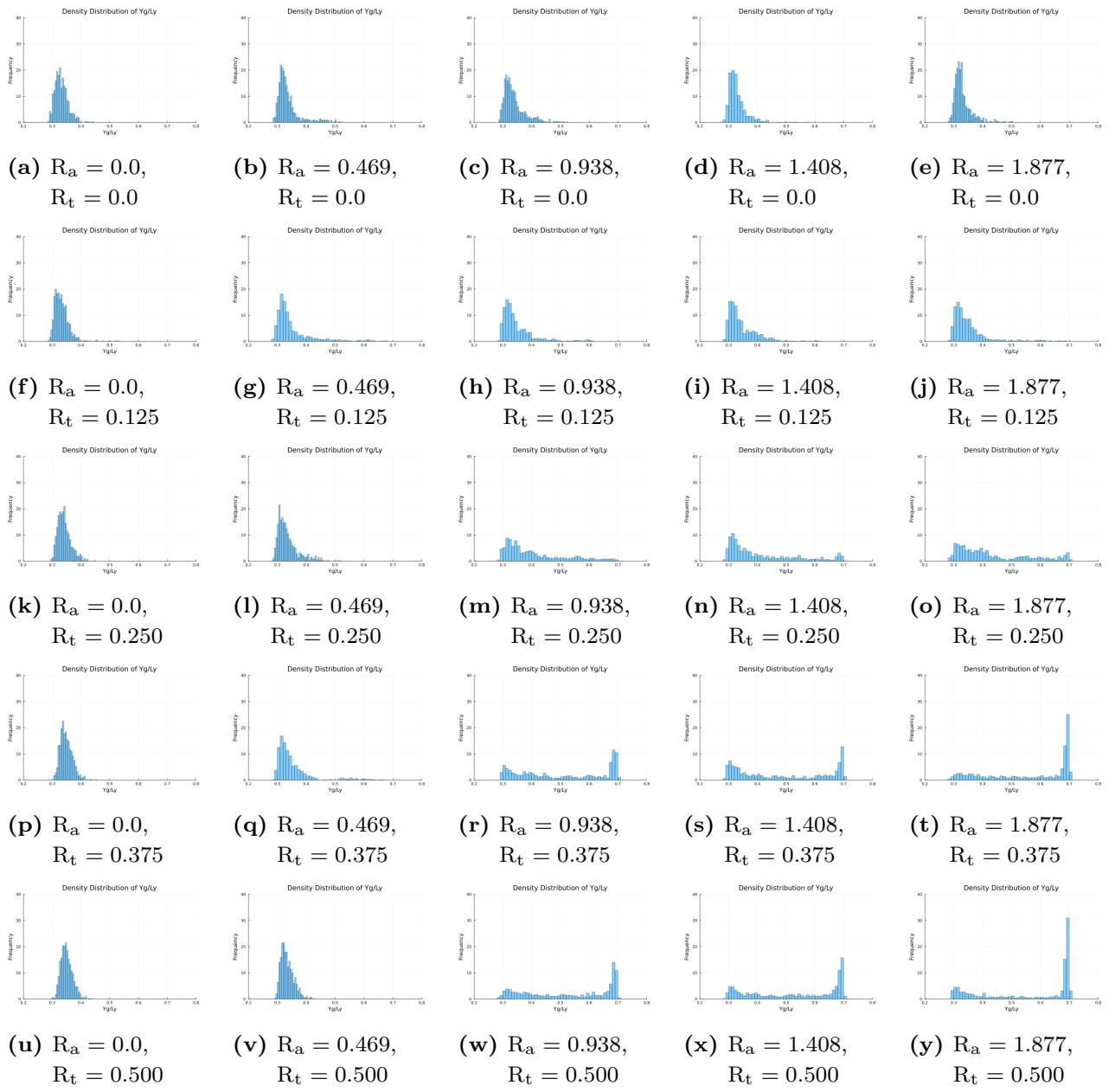


図 A.2: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに Y_g をプロットしたもののヒストグラム。

A.1.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

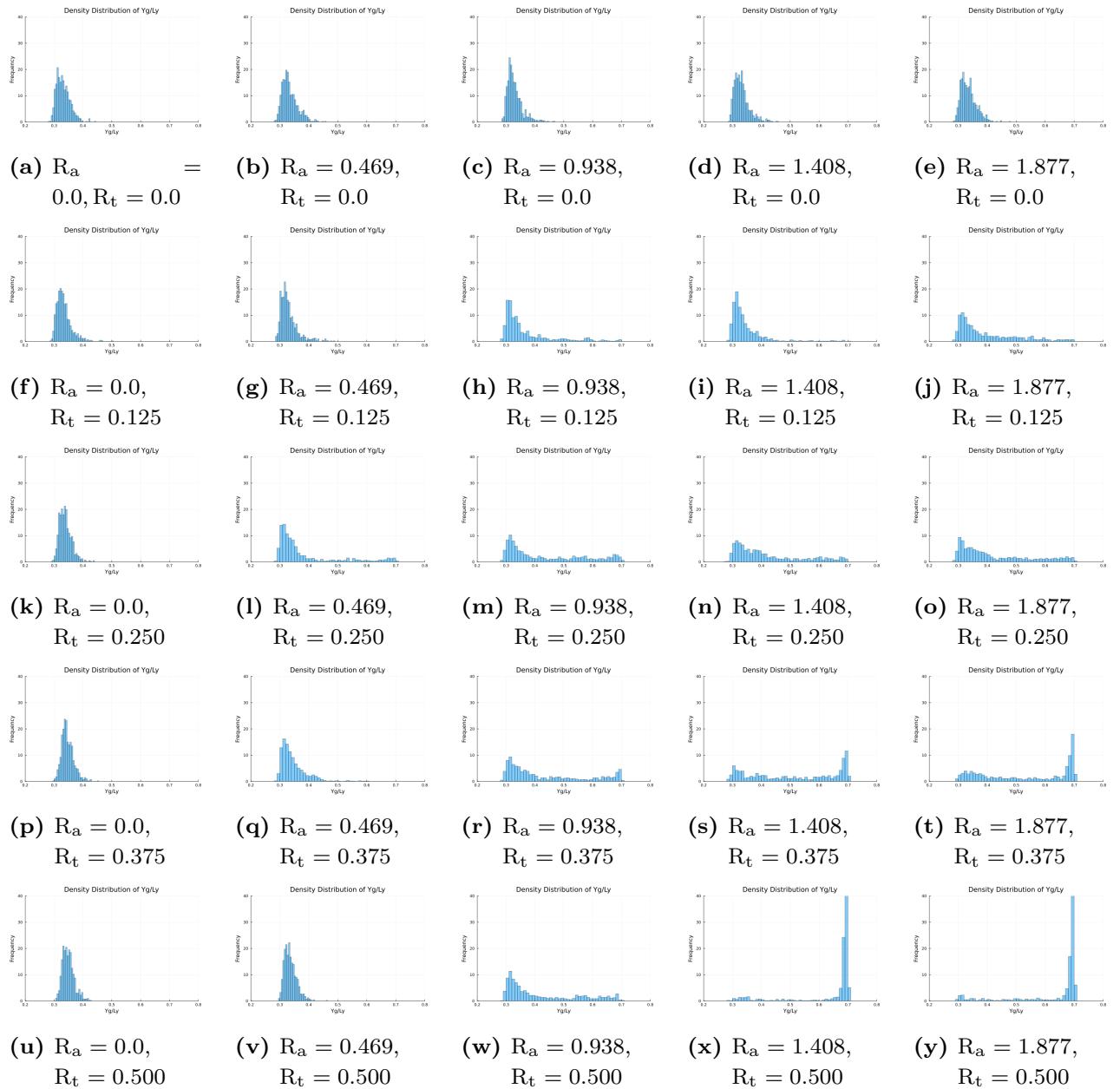


図 A.3: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

A.1.3 重力のみをかける



図 A.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.

A.1.4 热流のみをかける

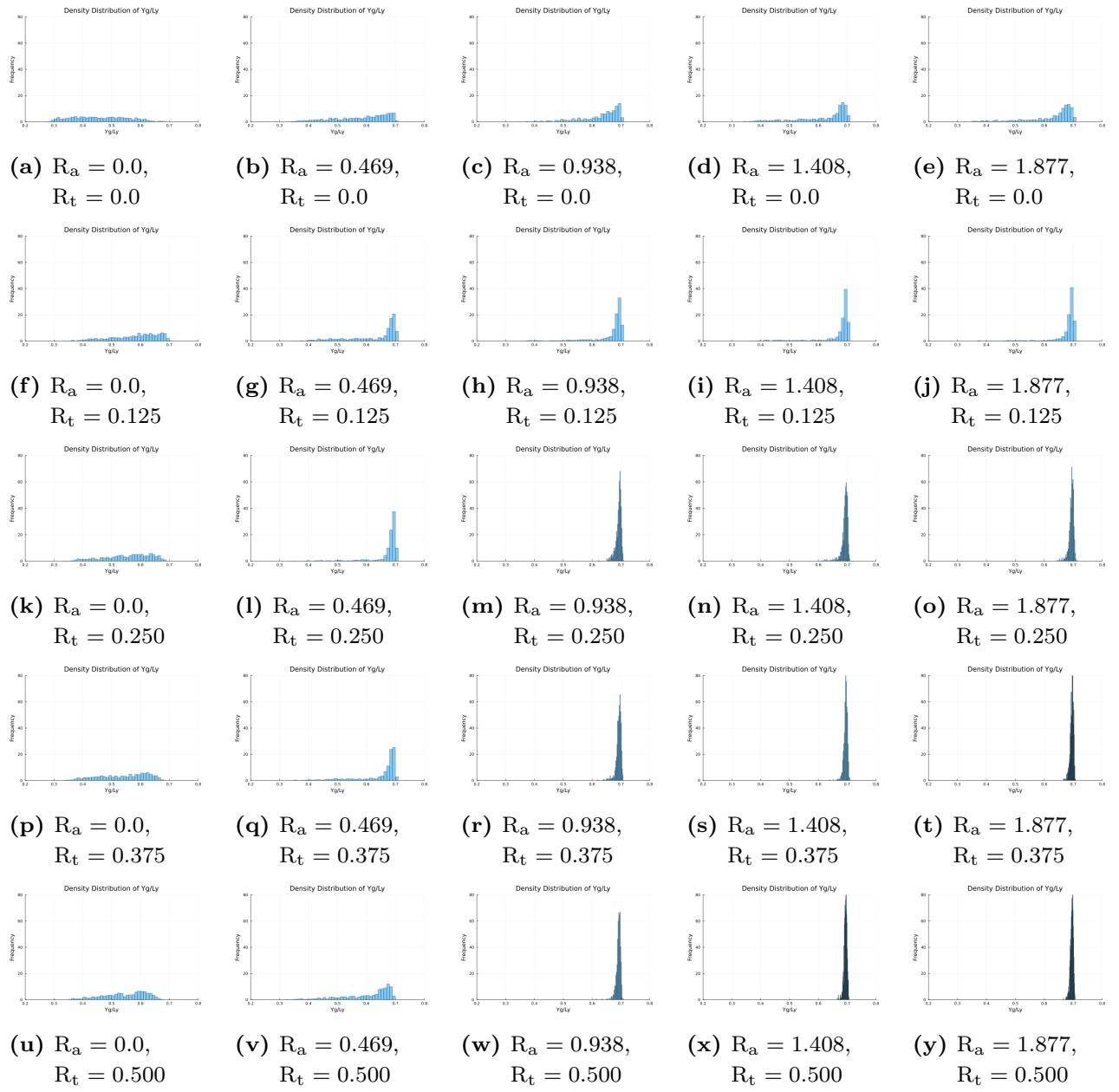


図 A.5: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.1.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

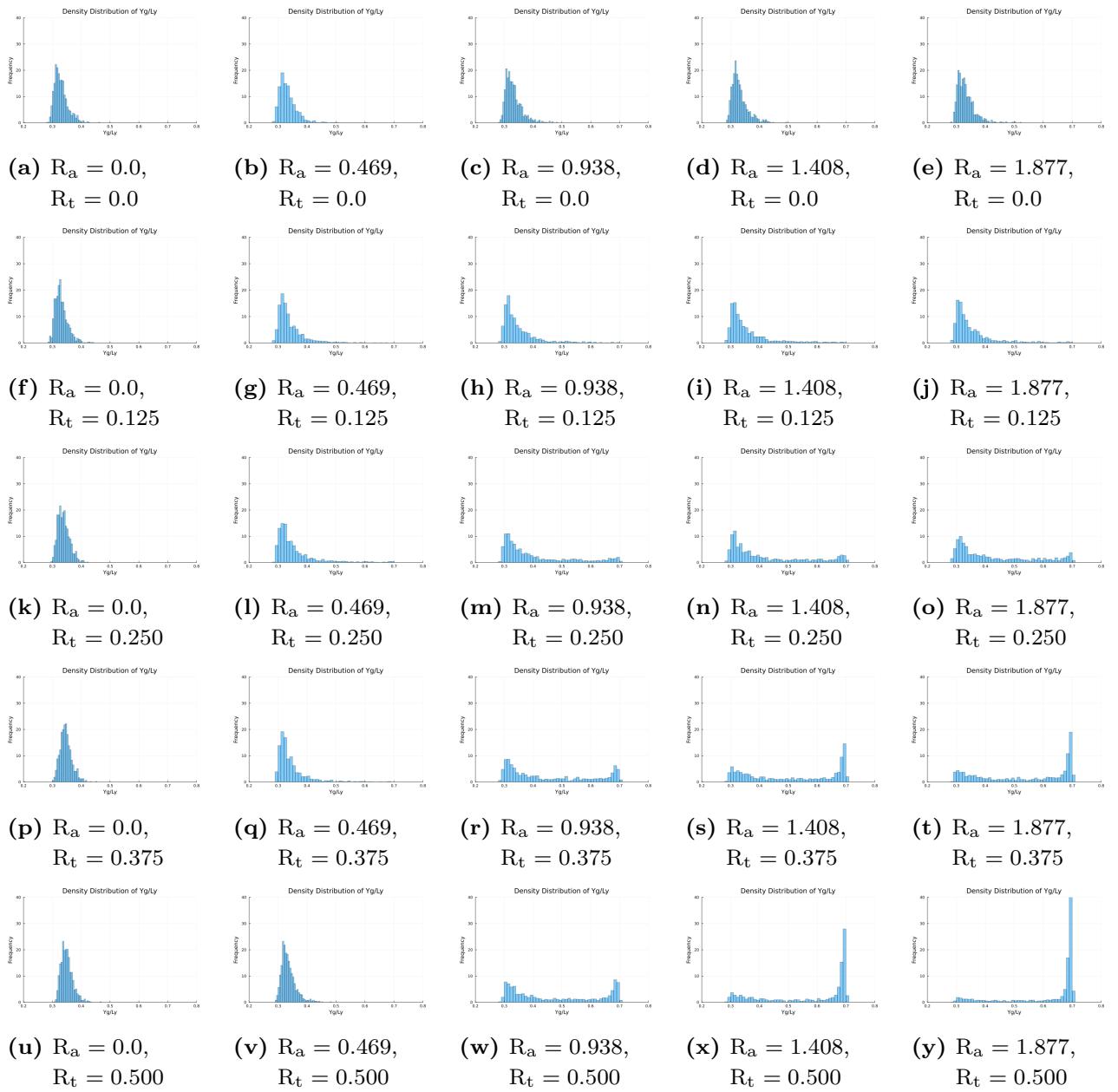


図 A.6: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.1.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

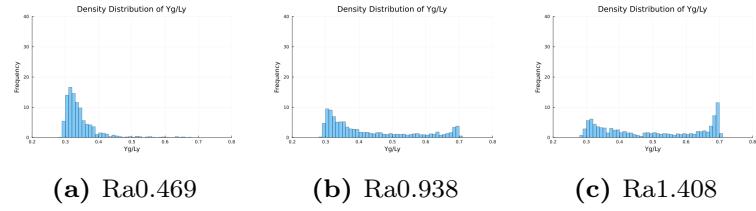


図 A.7: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 4.0 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.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。

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

A.2.1 重力と熱流を同時にかける

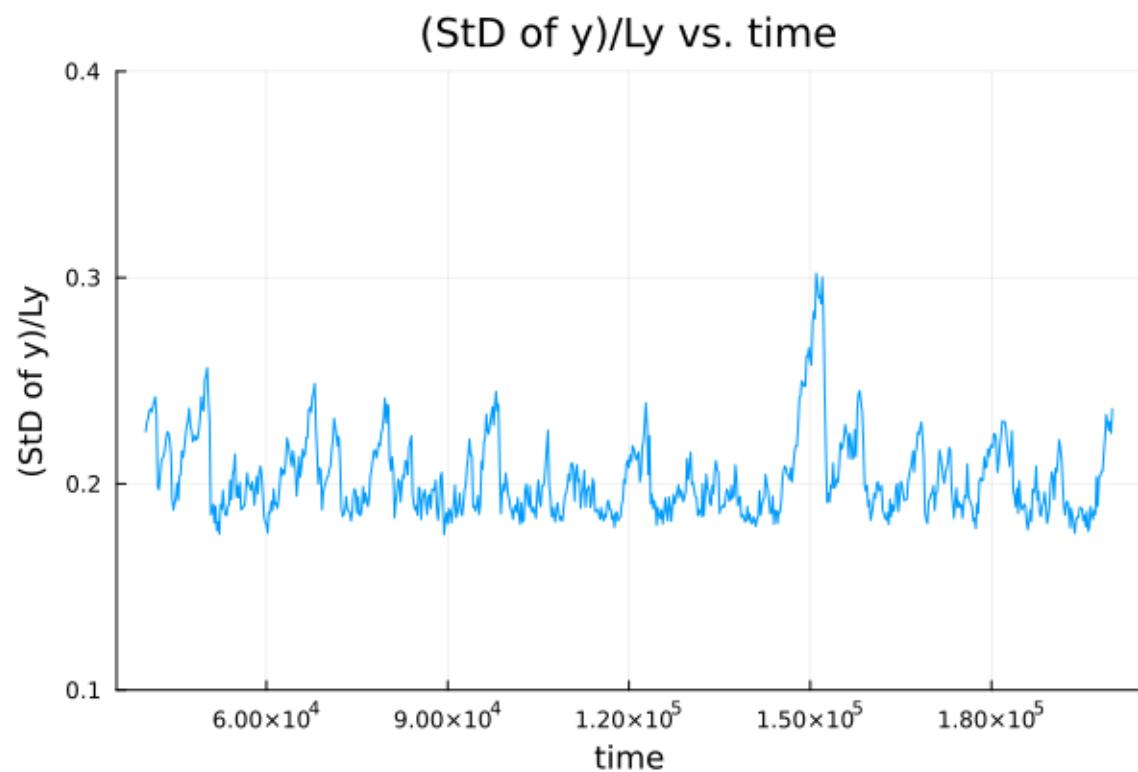


図 A.8: $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

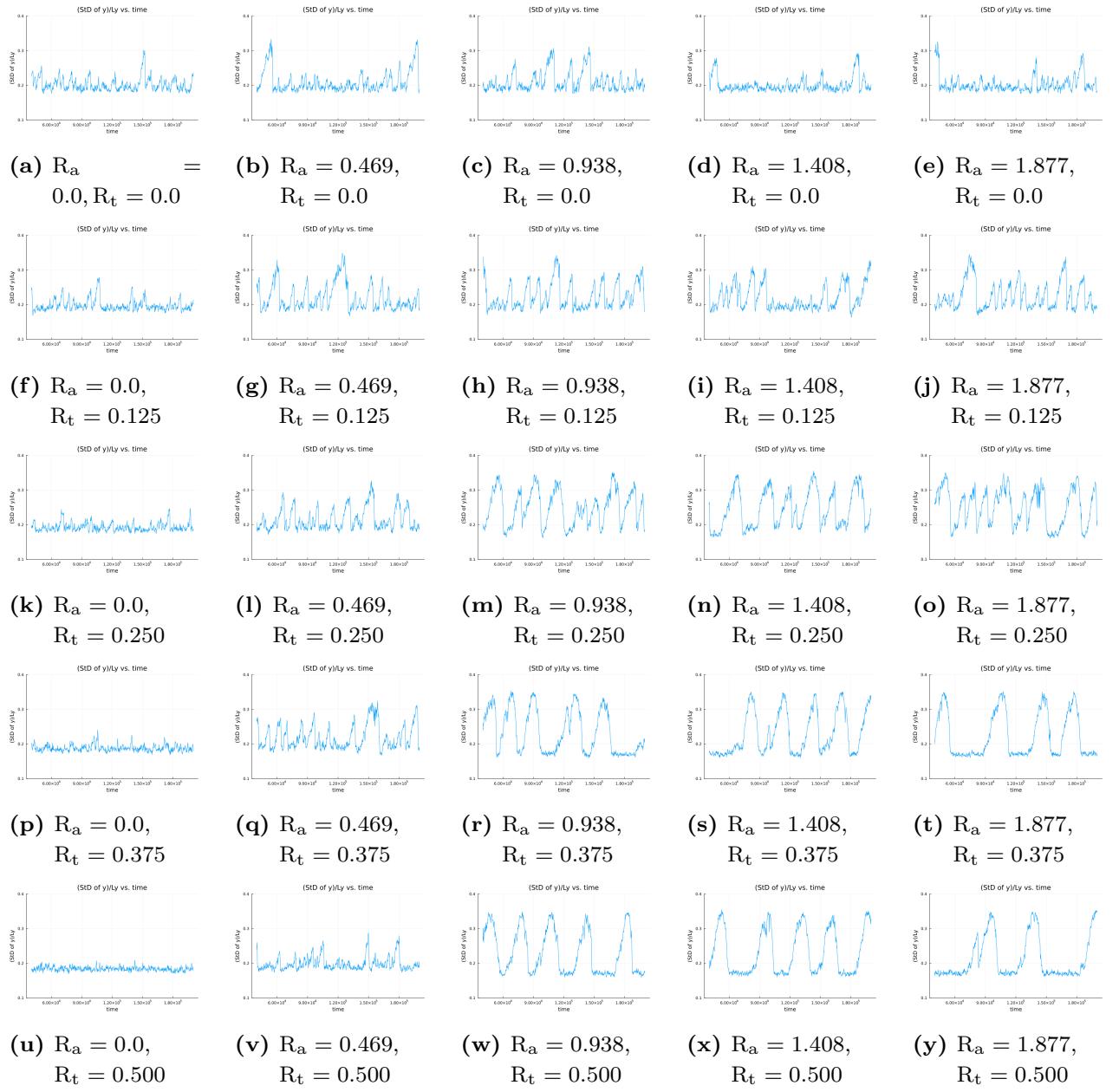


図 A.9: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット.

A.2.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

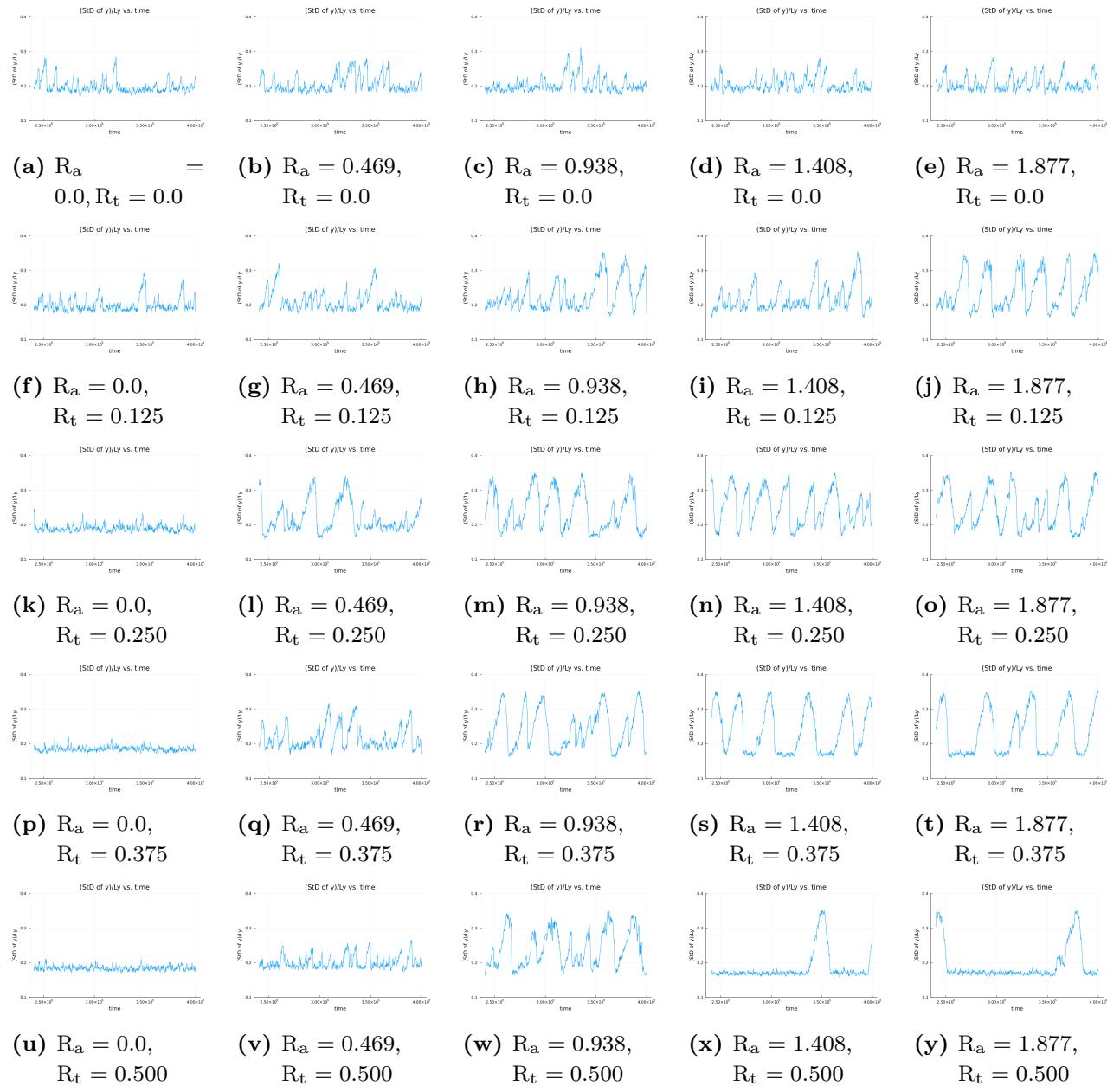


図 A.10: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット。

A.2.3 重力のみをかける

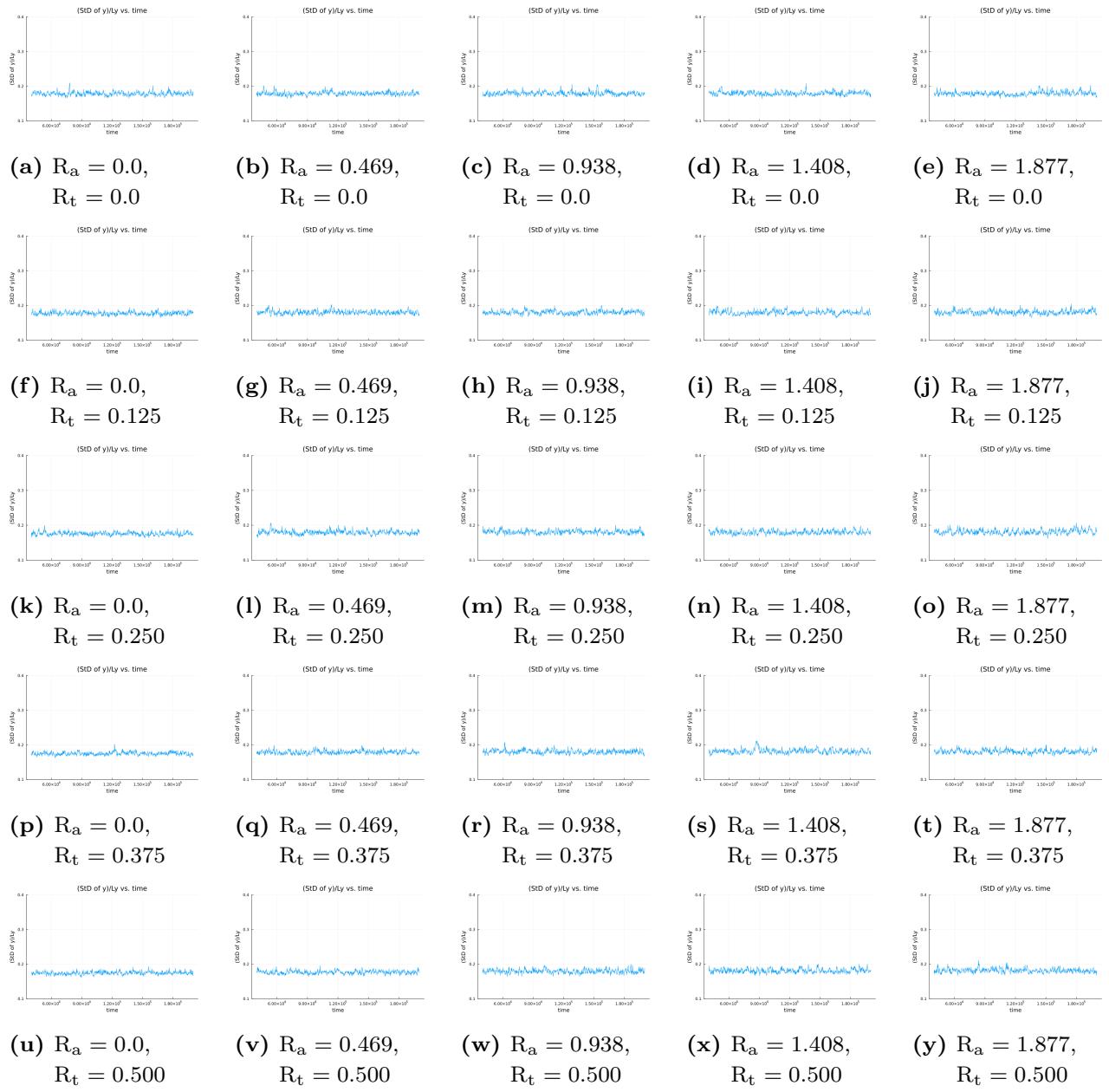


図 A.11: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.2.4 热流のみをかける

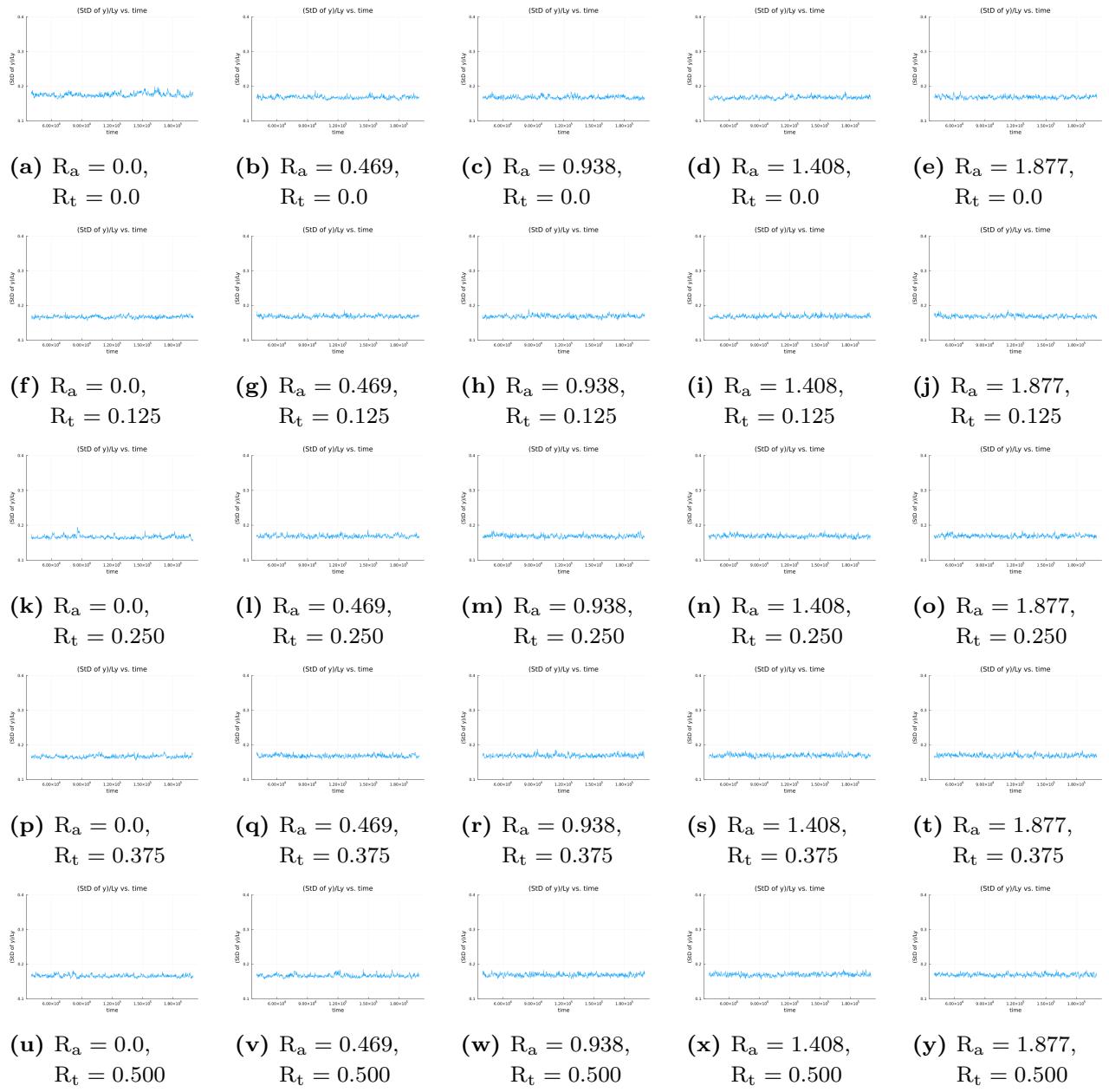


図 A.12: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.2.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

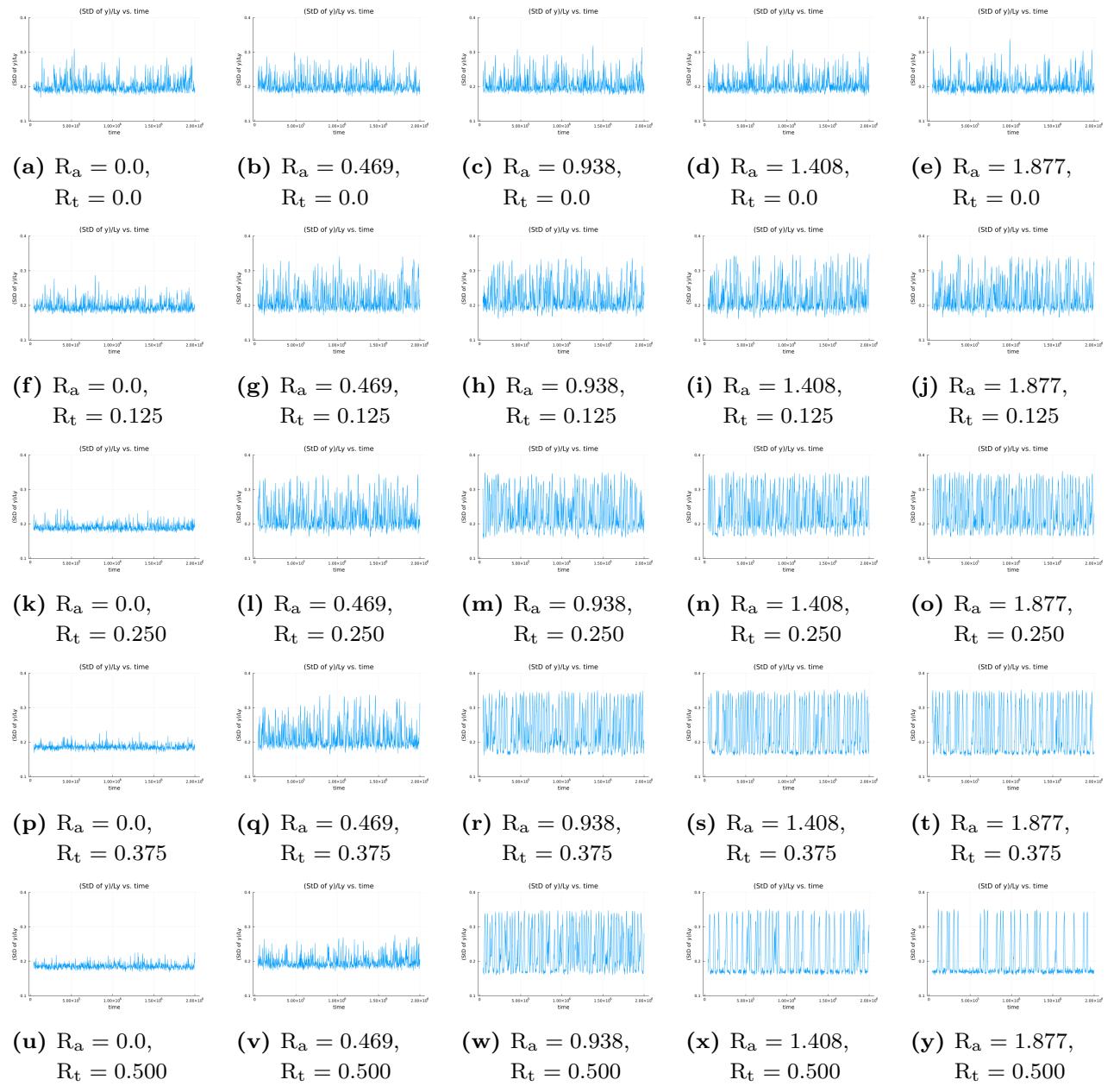


図 A.13: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.2.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

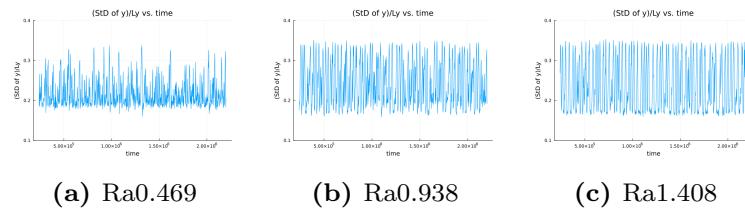
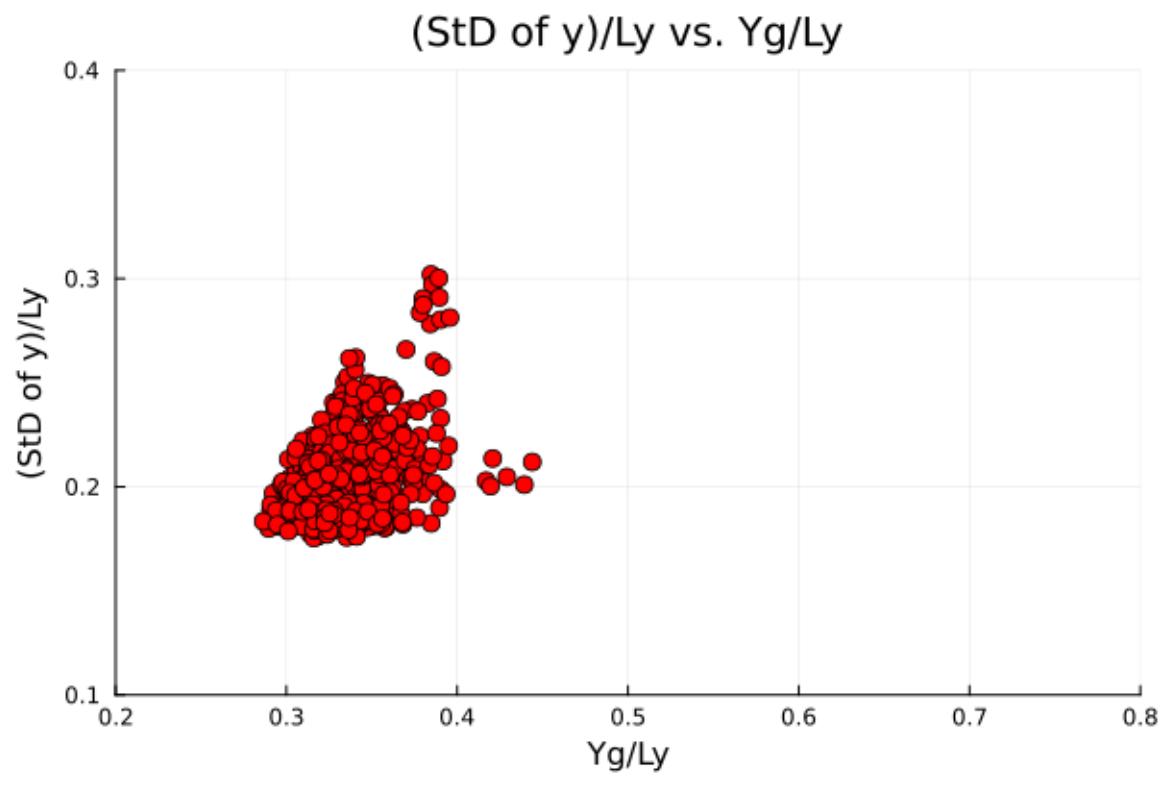


図 A.14: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.3 サイクル

A.3.1 重力と熱流を同時にかける



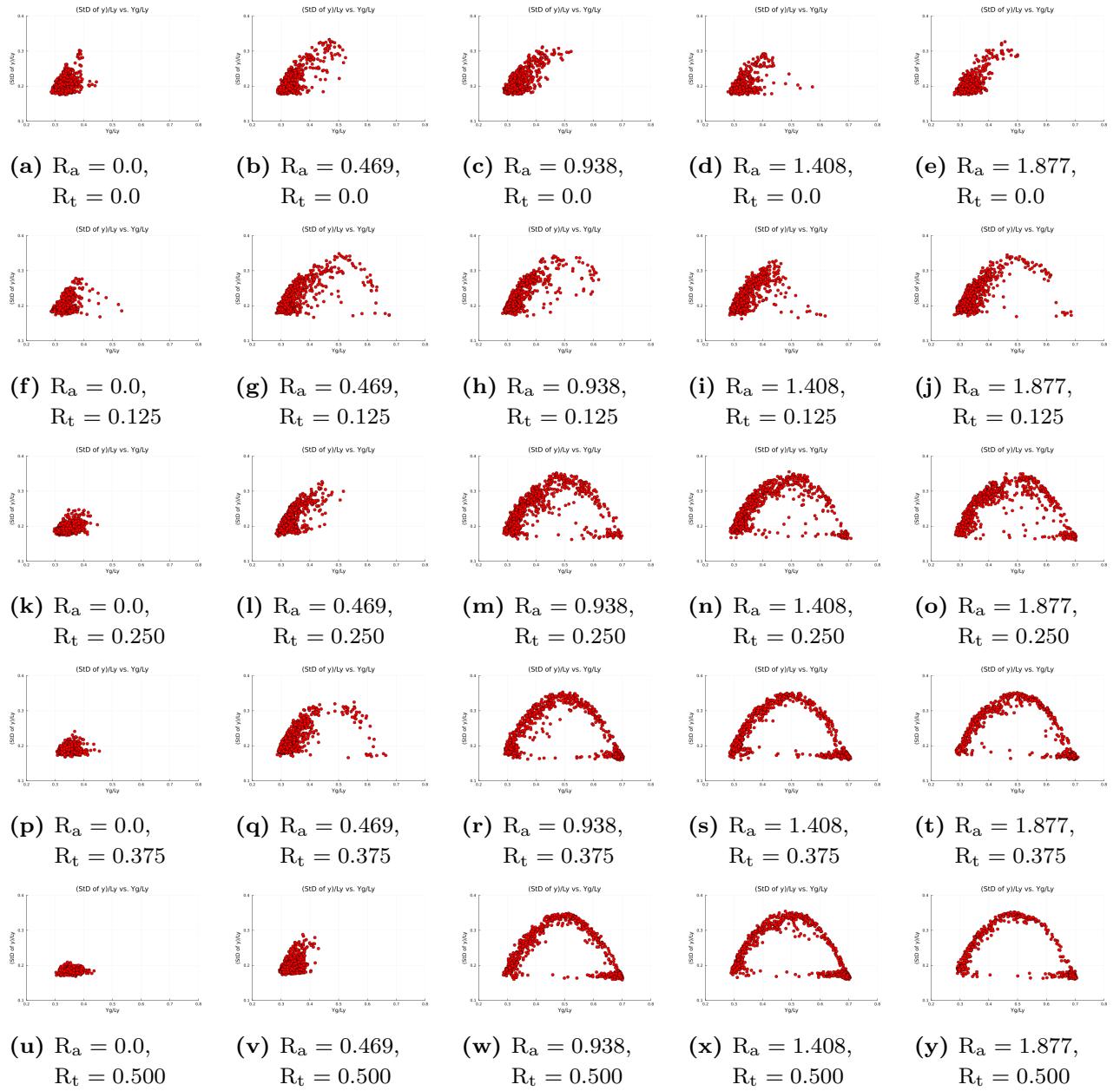


図 A.16: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.3.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

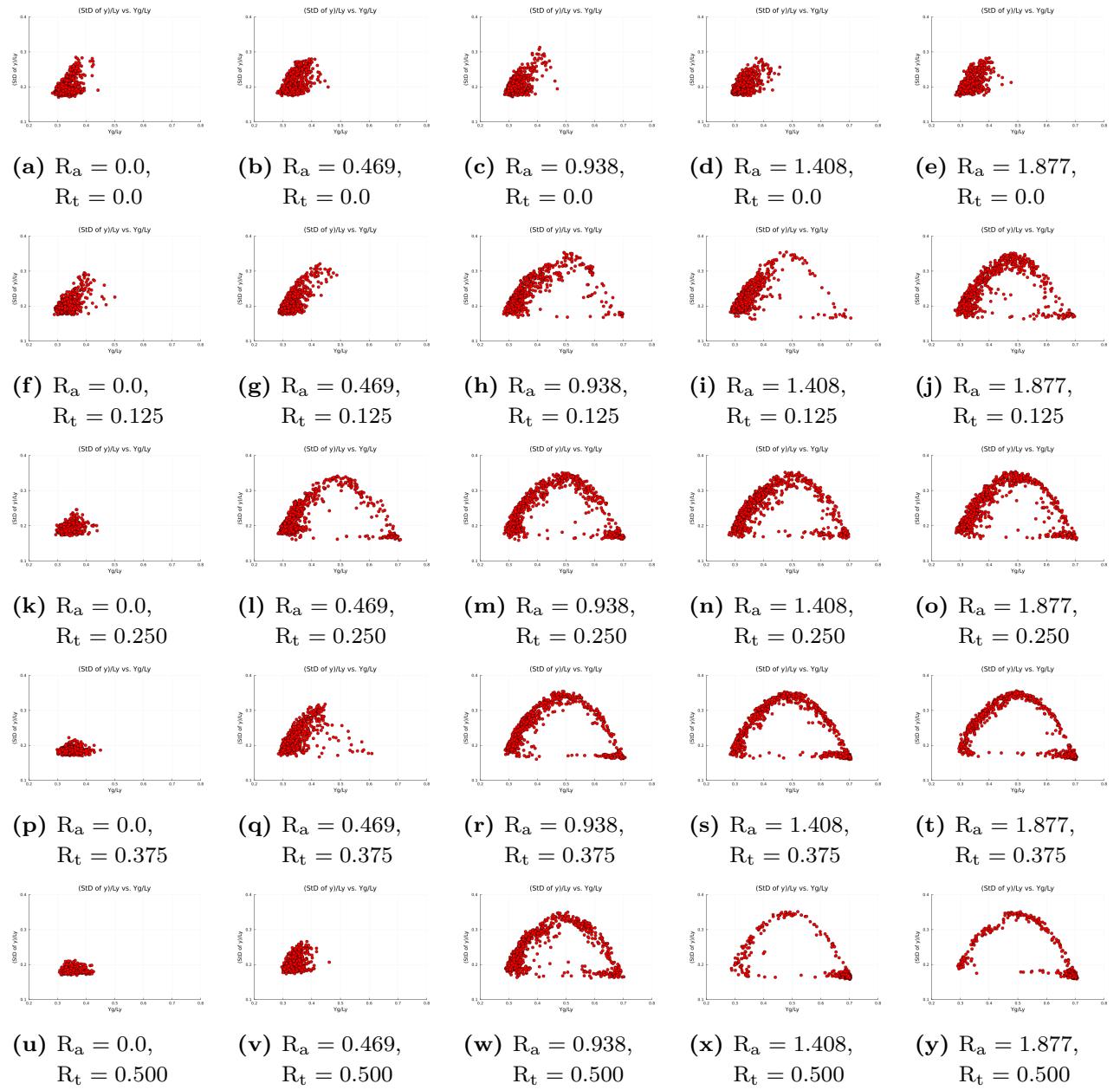


図 A.17: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

A.3.3 重力のみをかける

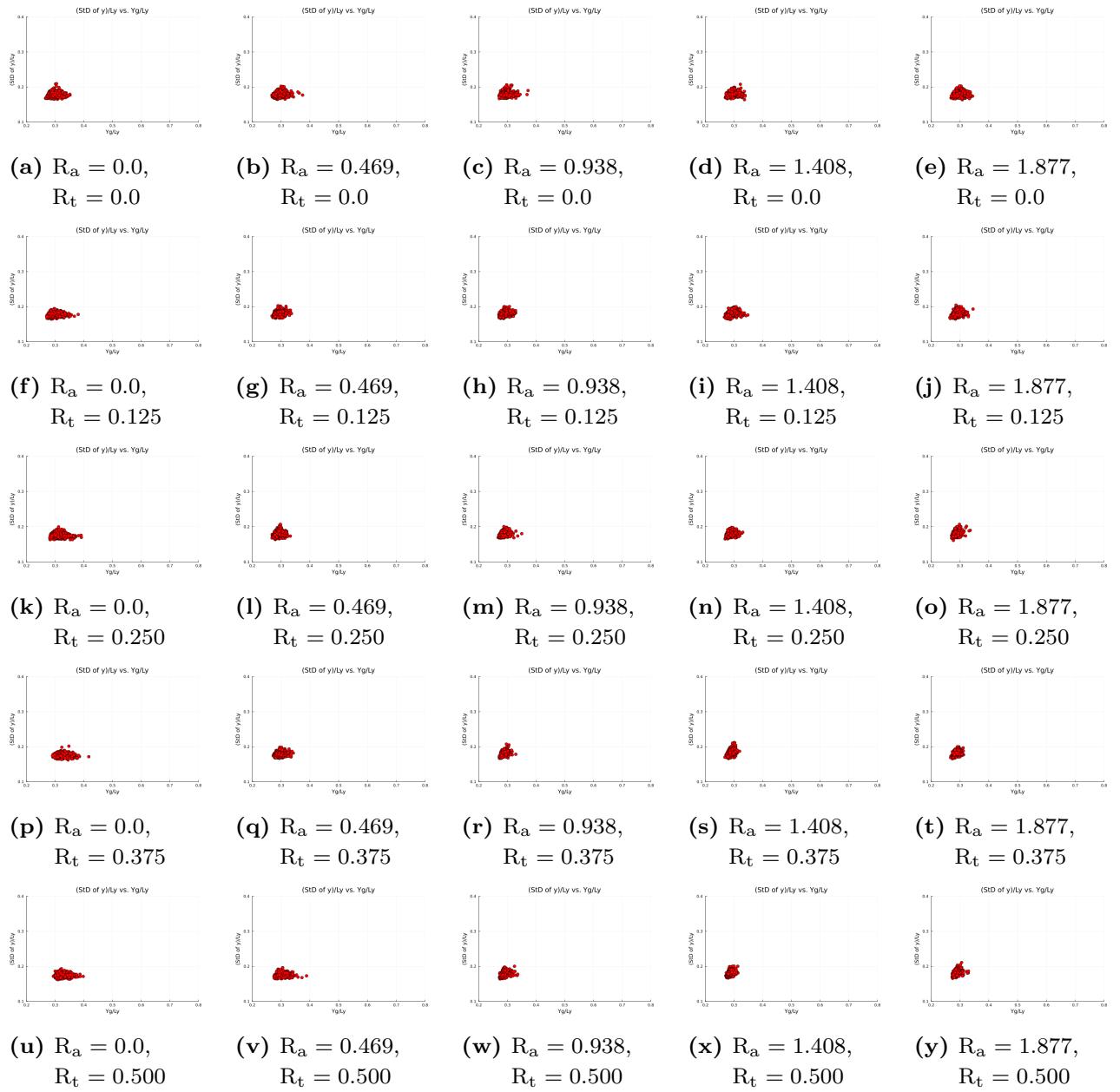


図 A.18: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.3.4 熱流のみをかける

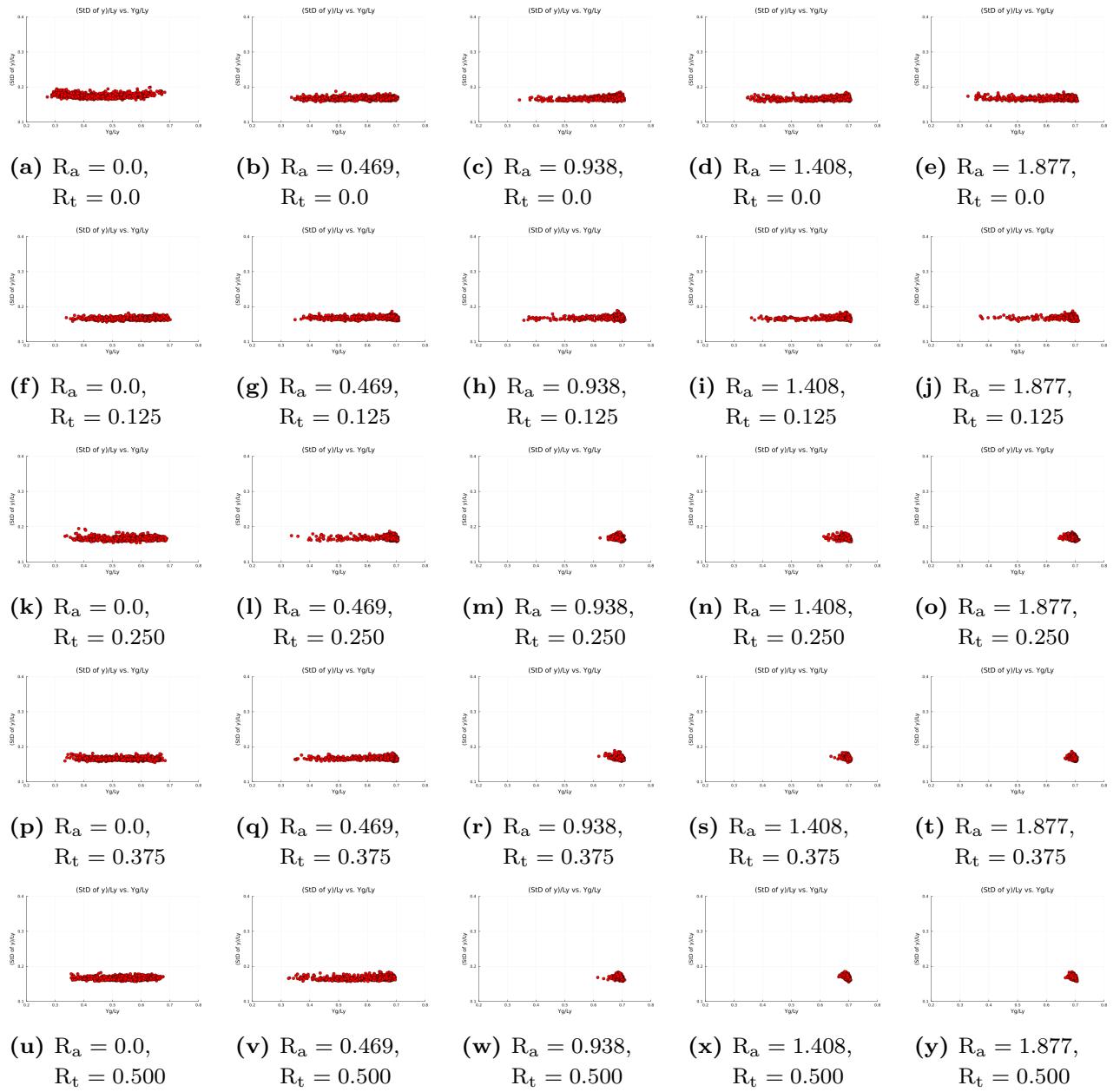


図 A.19: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.3.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

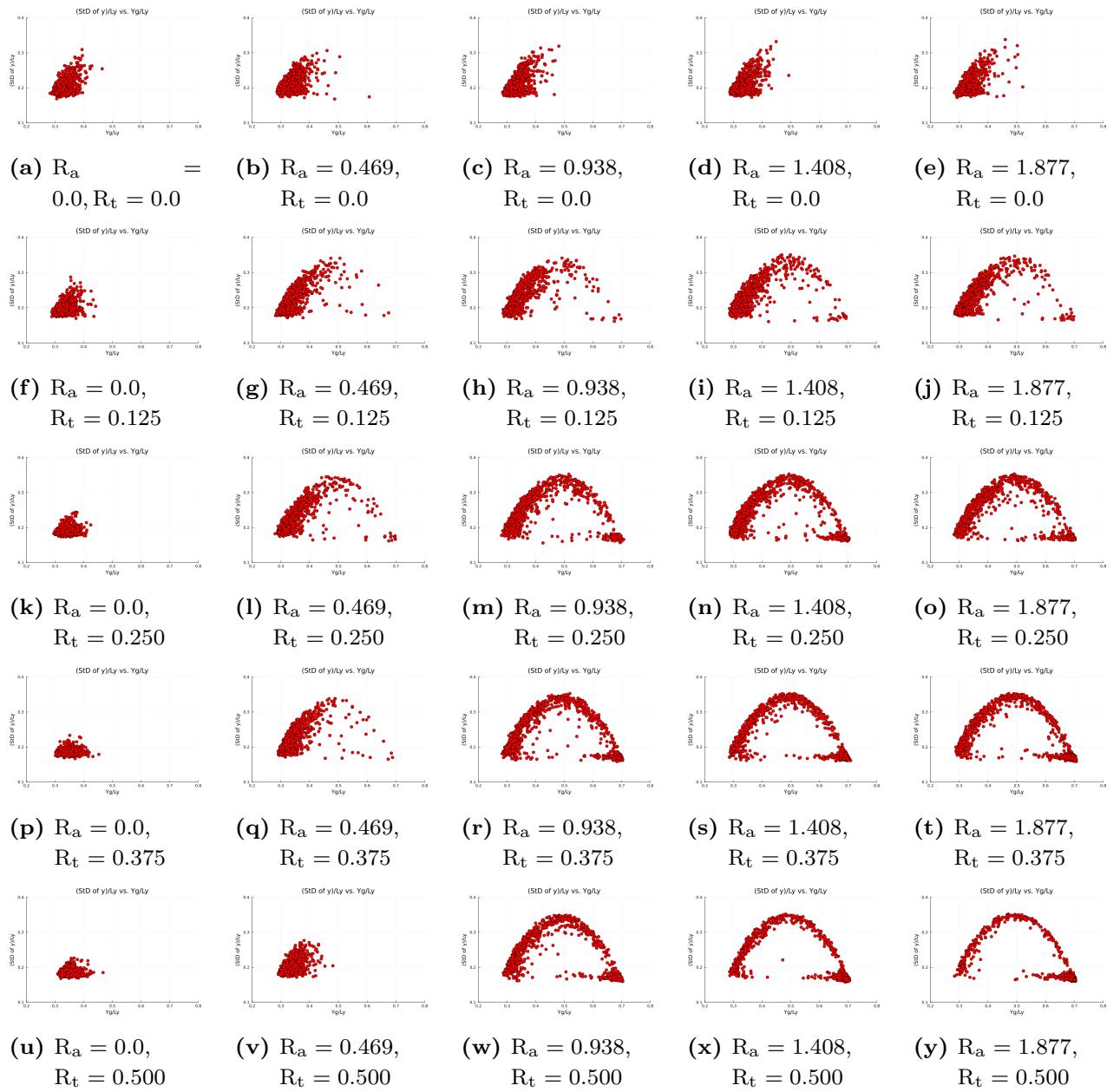


図 A.20: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.3.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

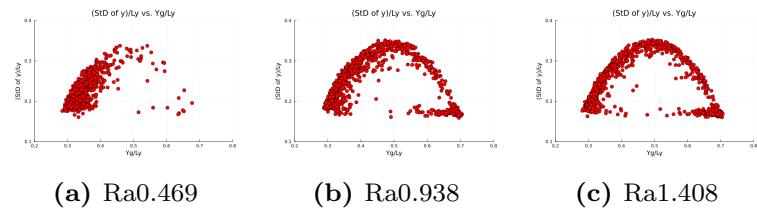
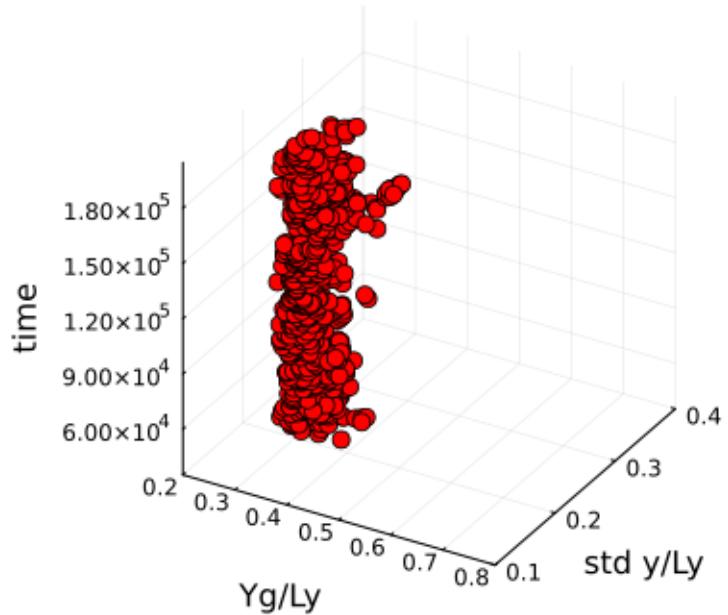


図 A.21: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.4 サイクル 3D

A.4.1 重力と熱流を同時にかける

(Std of y)/Ly vs. Yg/Ly over Time



(a) $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

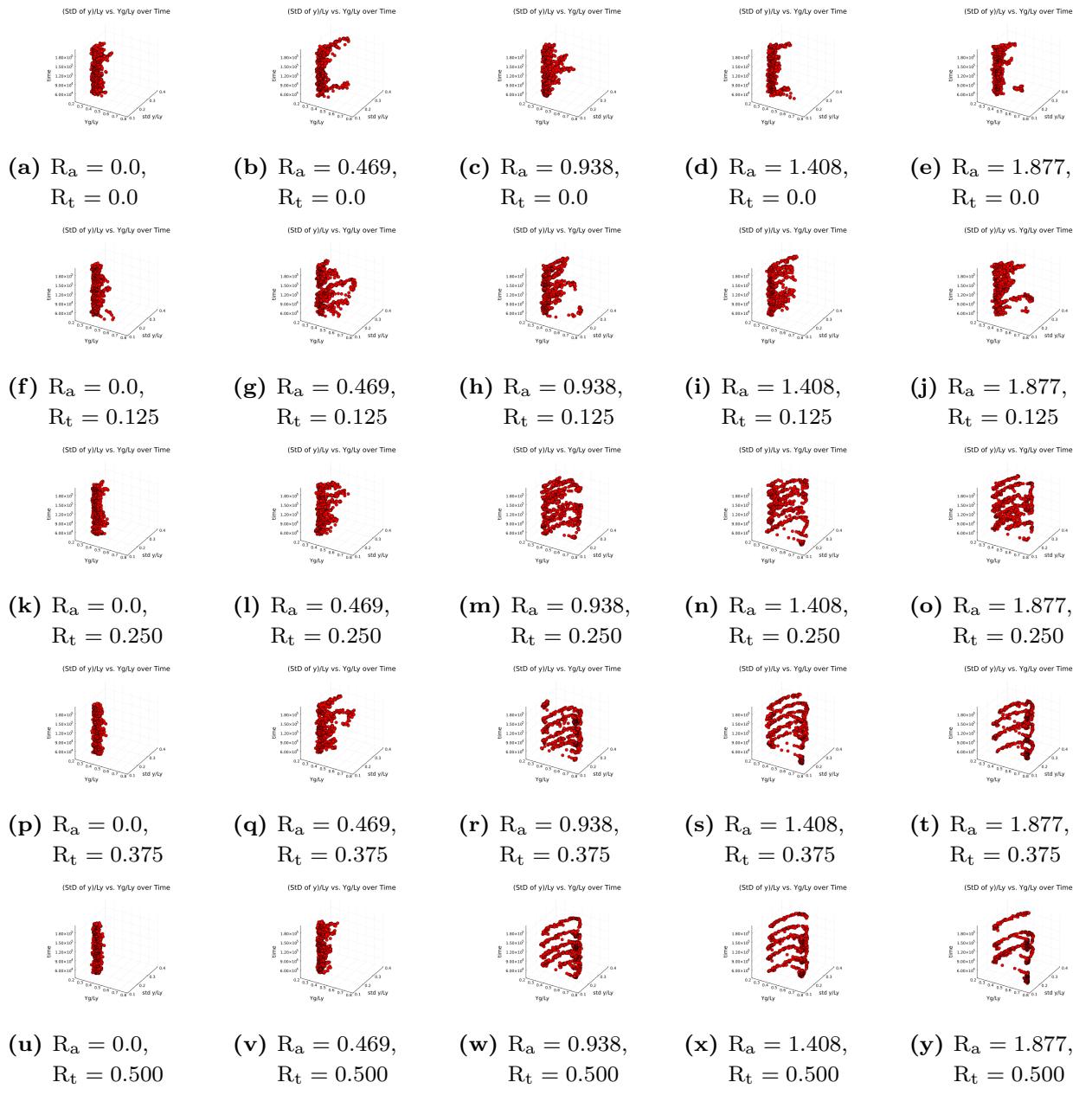


図 A.23: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.4.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

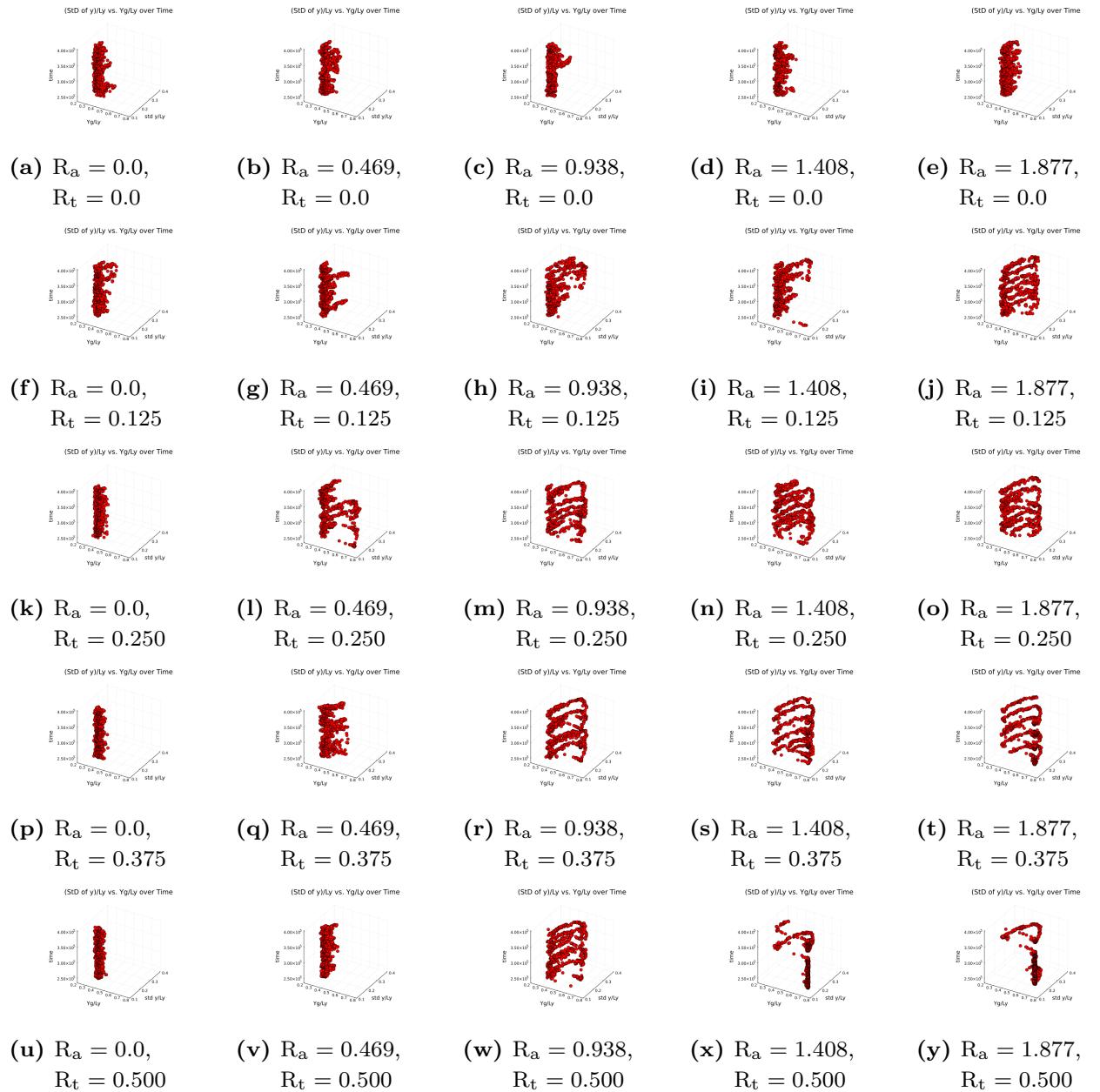


図 A.24: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

A.4.3 重力のみをかける

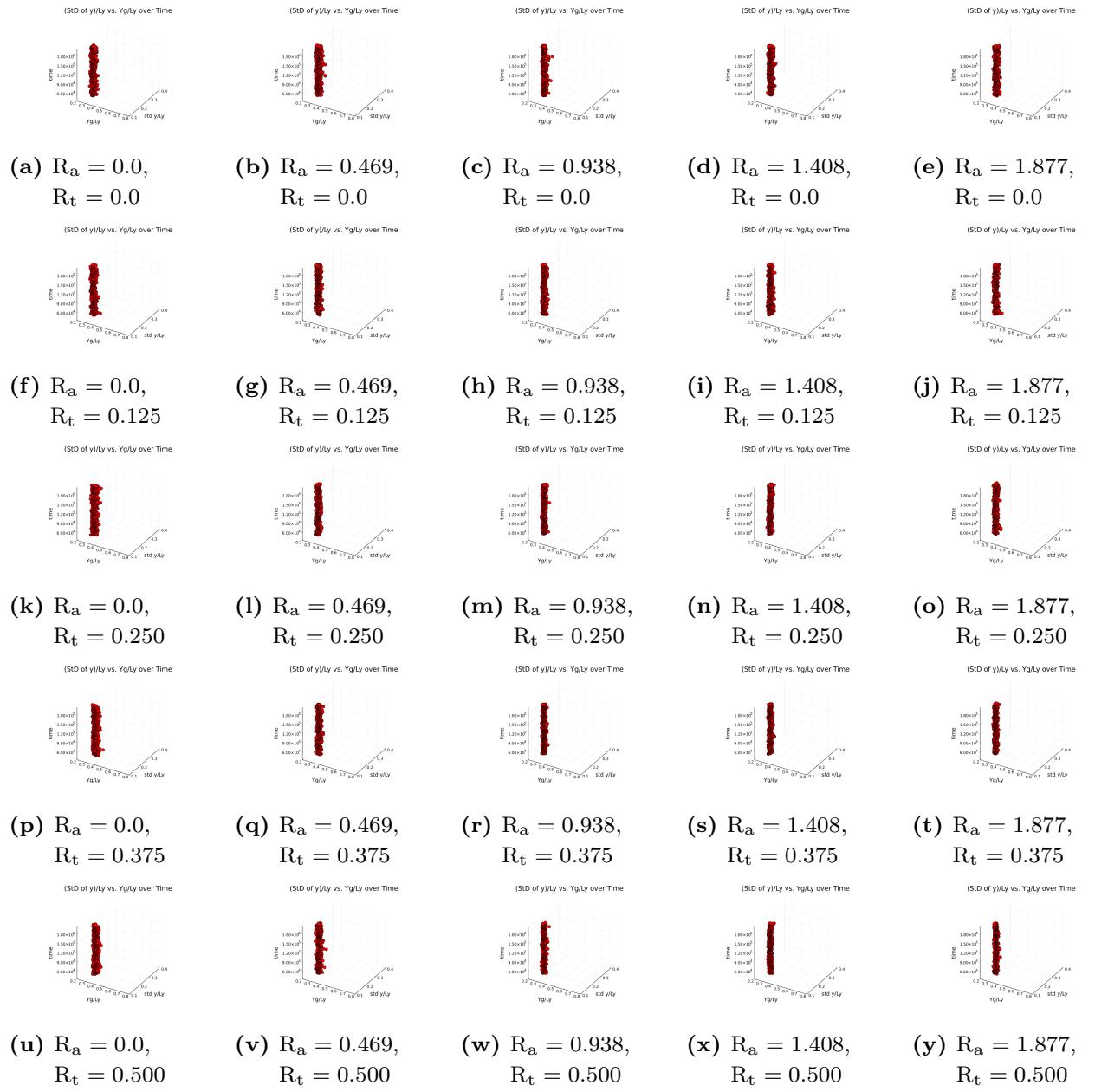


図 A.25: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.4.4 热流のみをかける

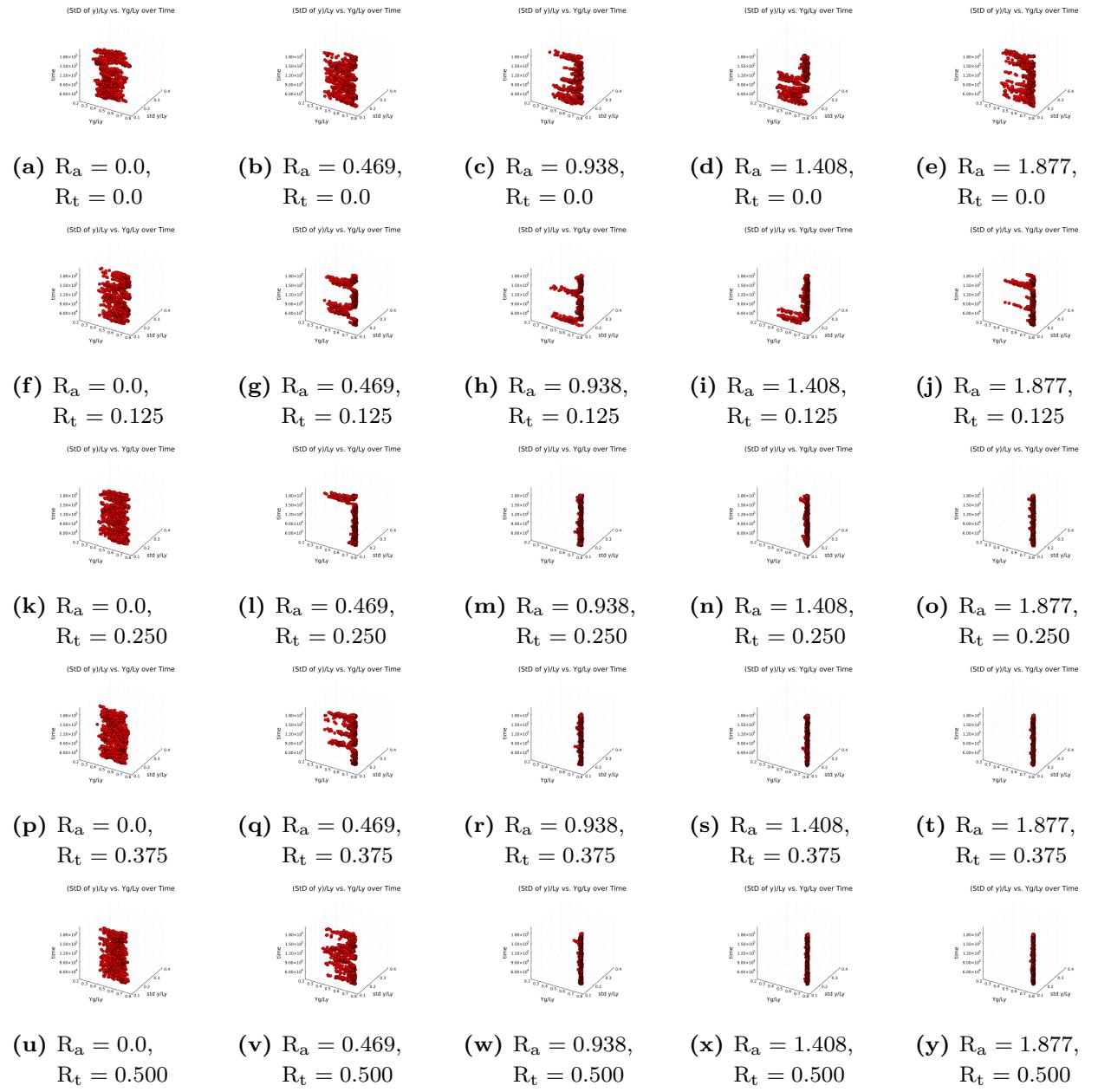


図 A.26: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

A.4.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

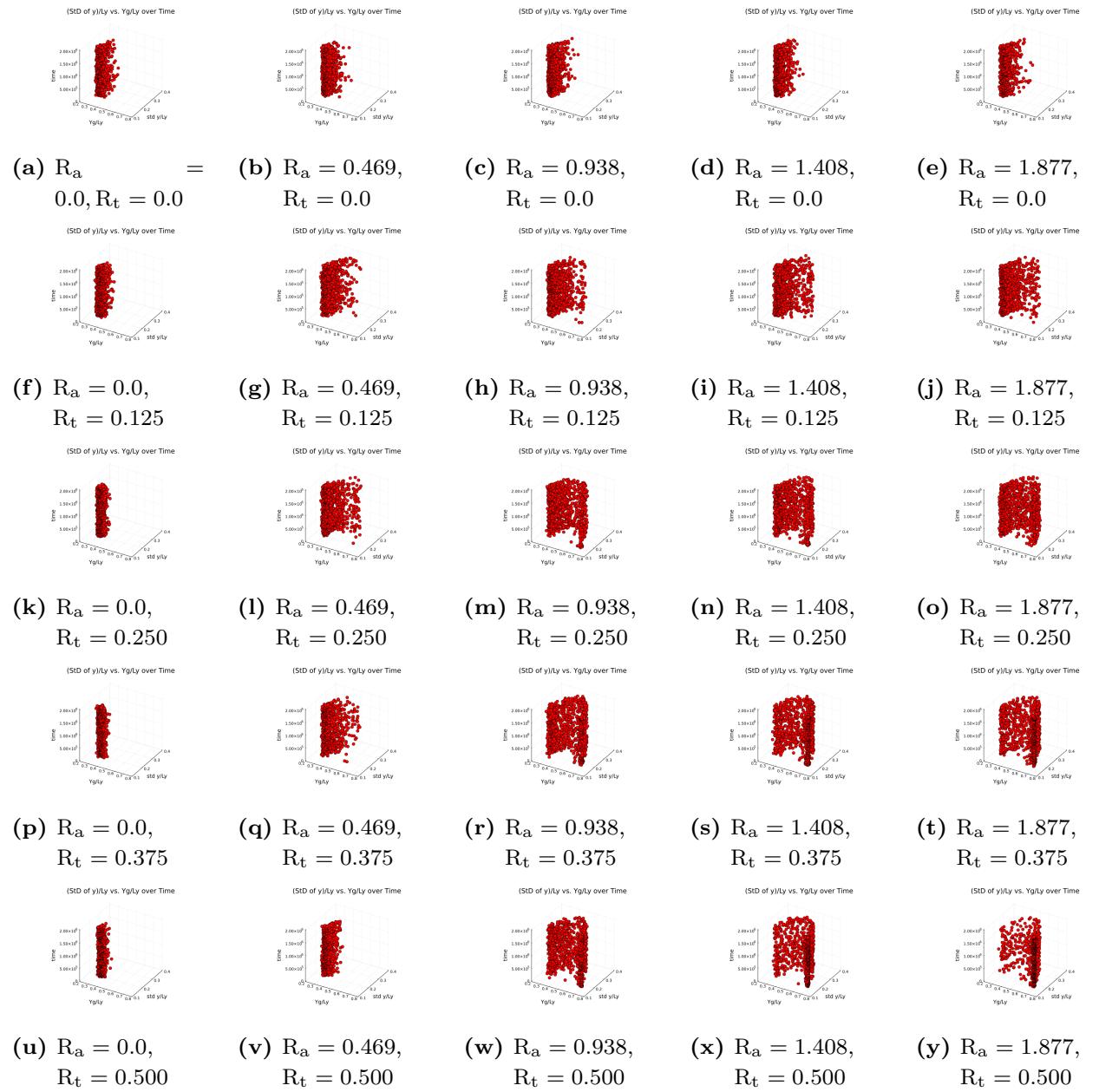


図 A.27: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.4.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

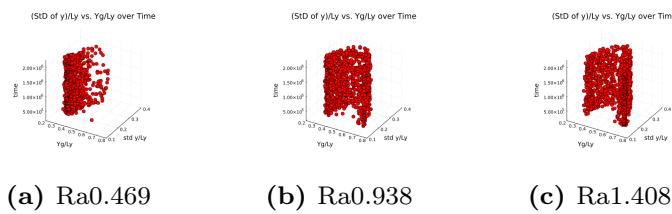


図 A.28: $t_i = 2.4 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

A.5 ヒートマップ

最初に全体図を示してから、各画像を拡大したものを載せる。

A.5.1 重力と熱流を同時にかける

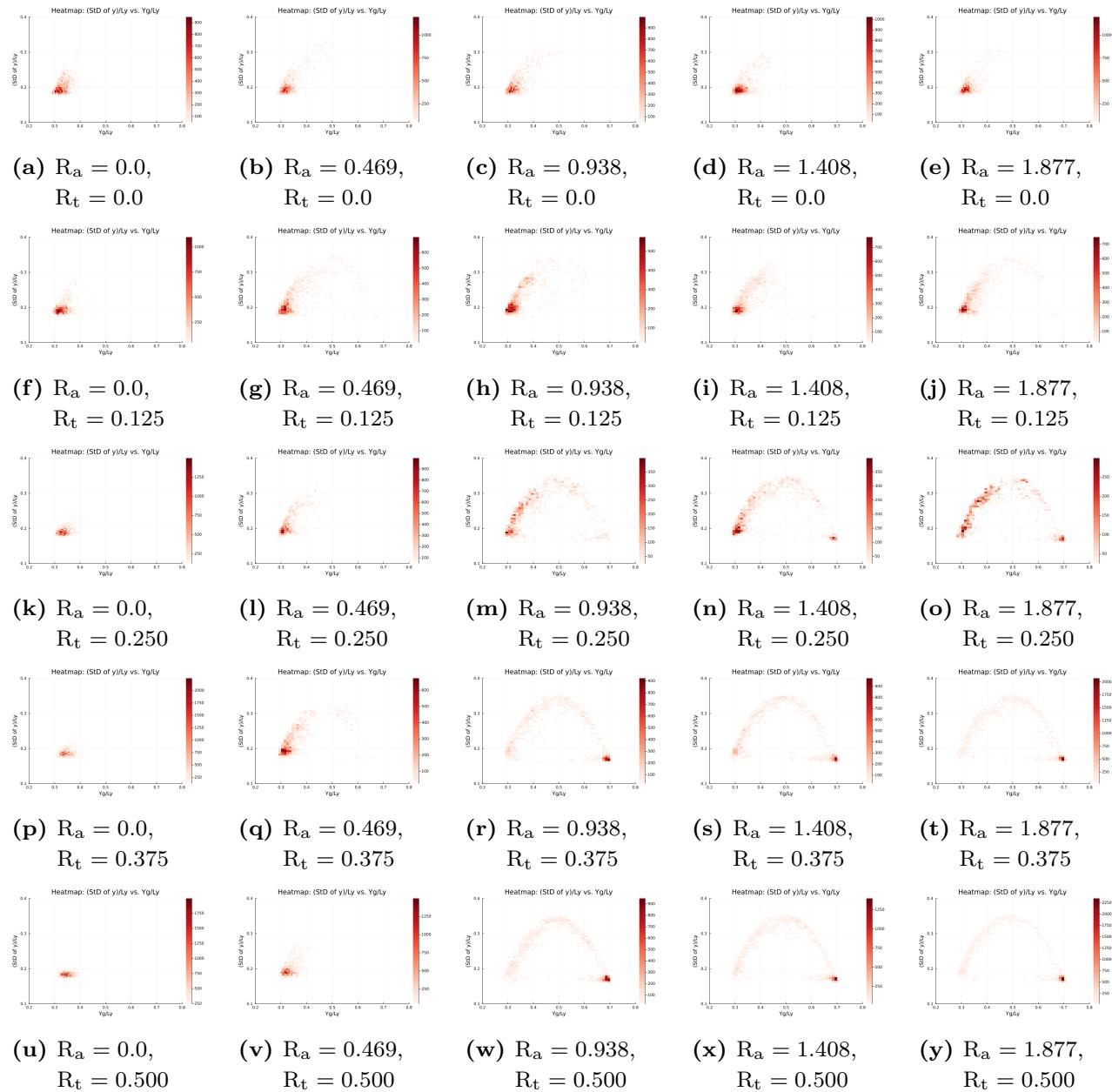


図 A.29: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

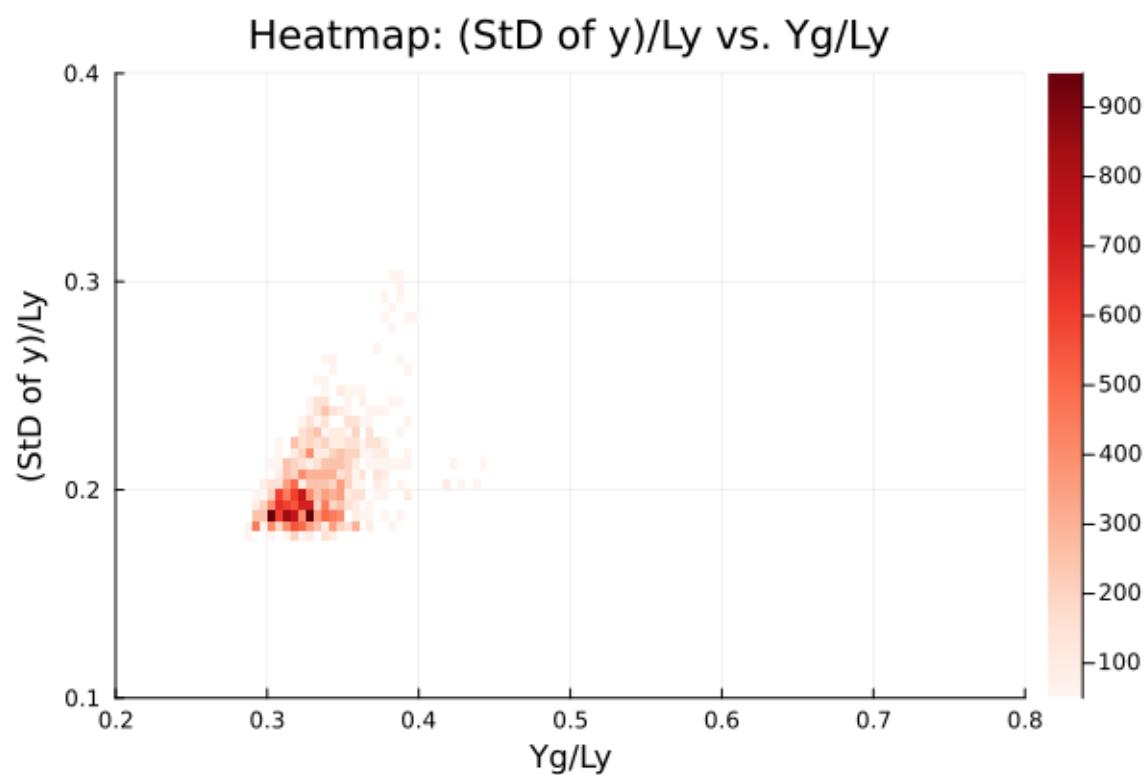
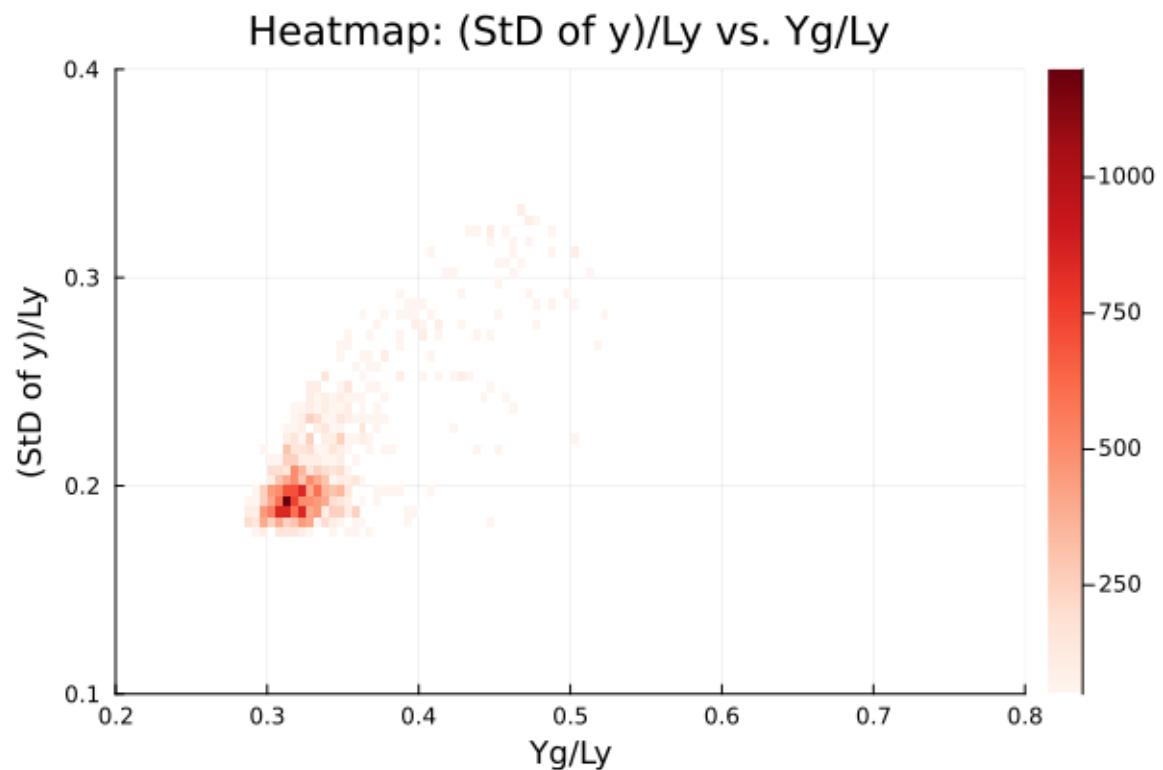
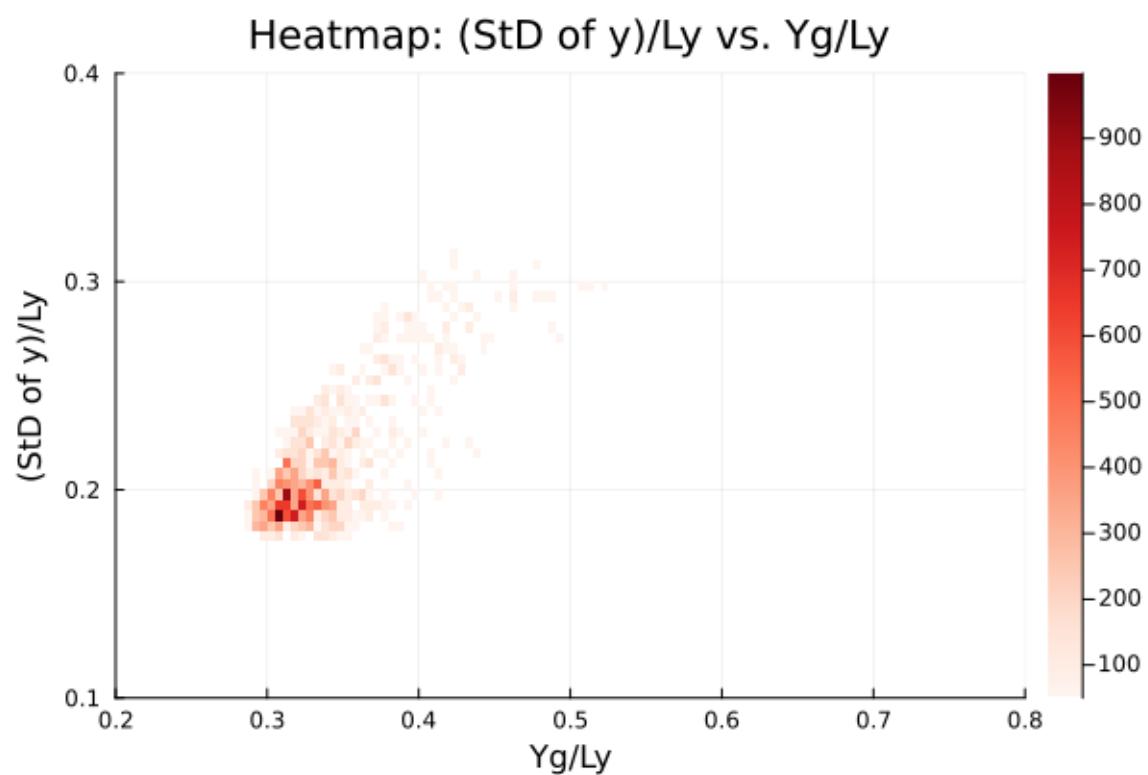


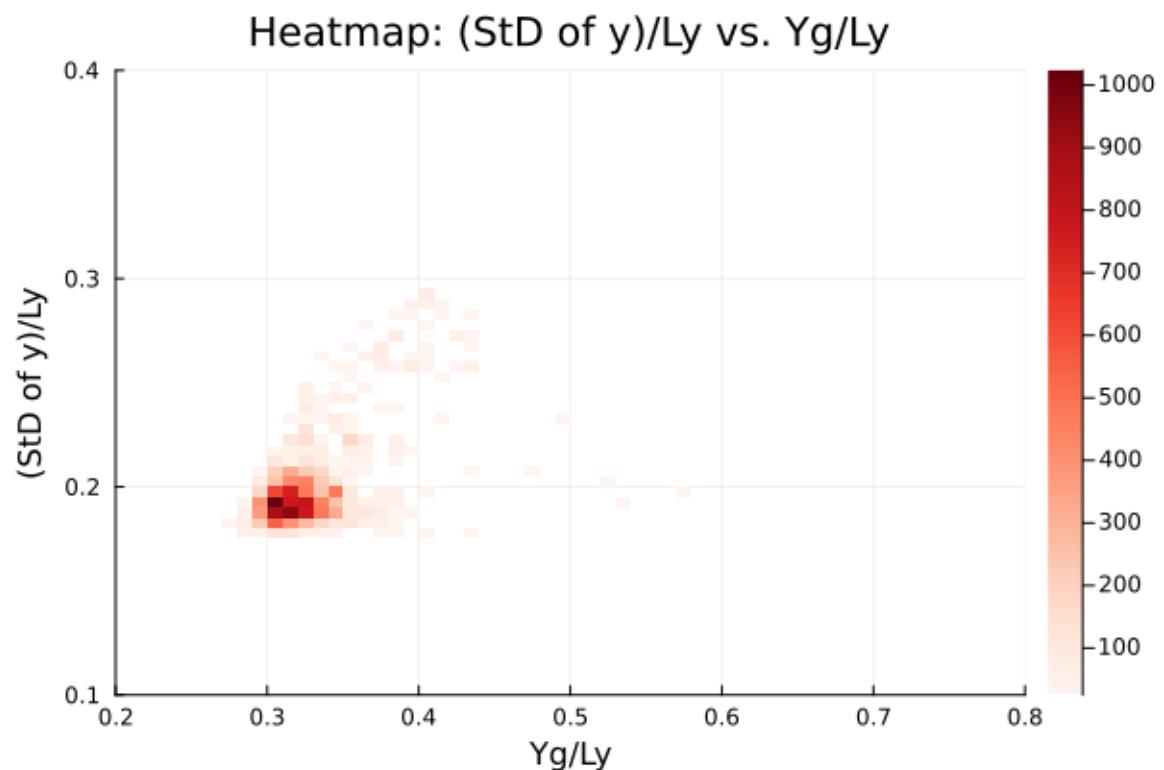
図 A.30: 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.0$



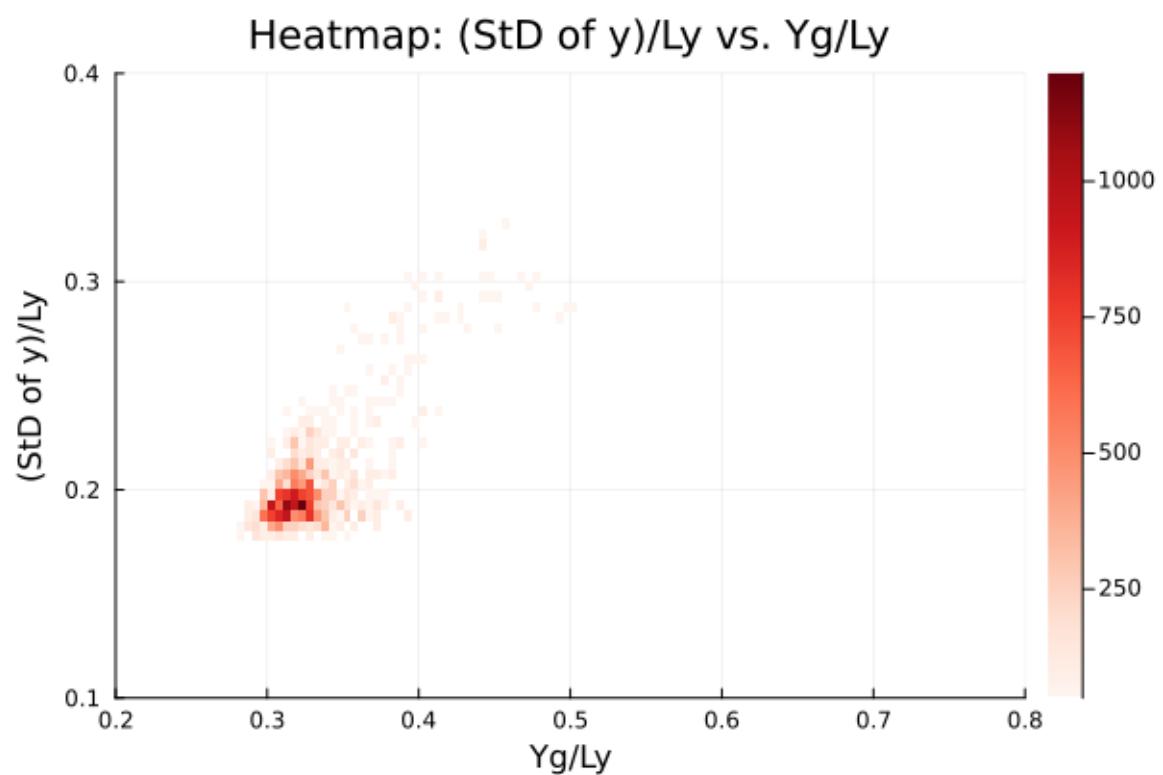
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.0$



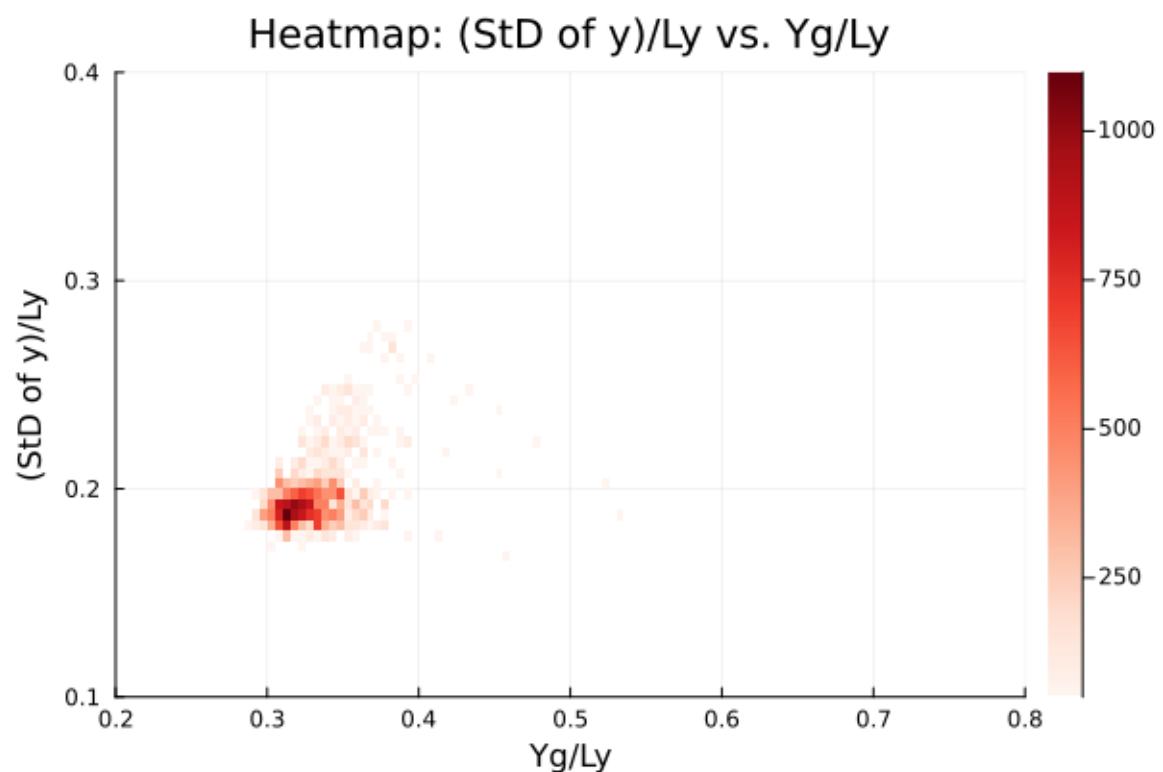
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.0$



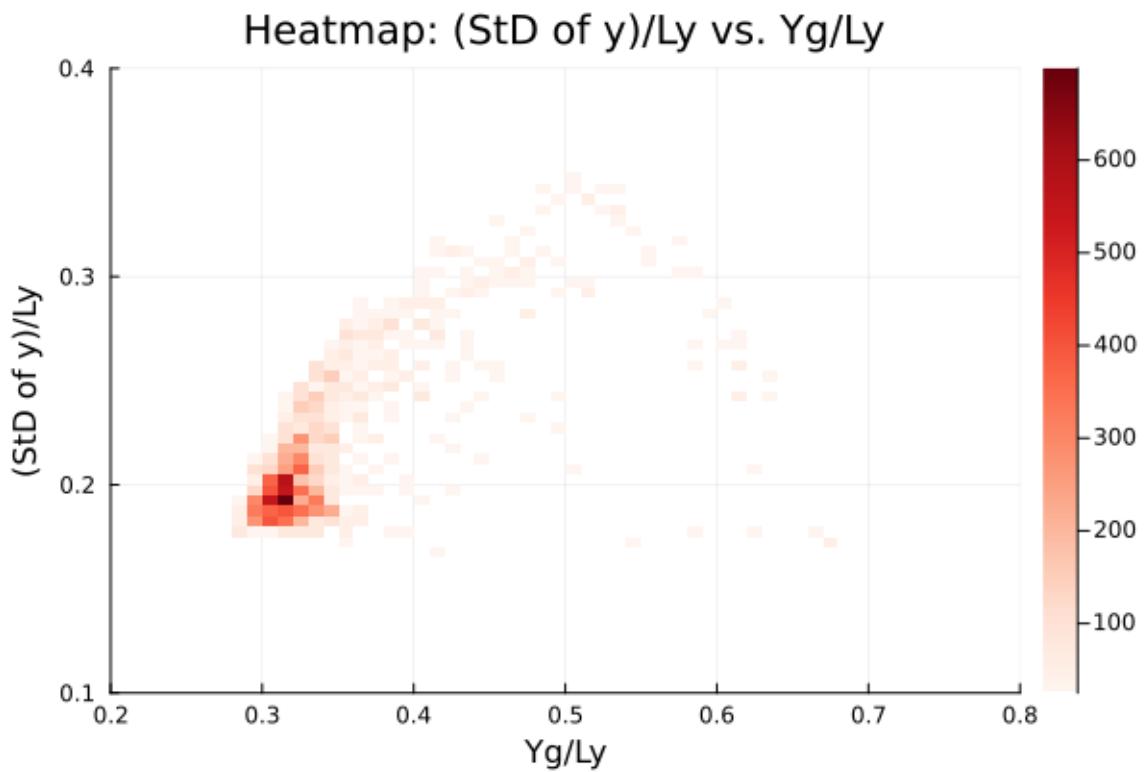
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.0$



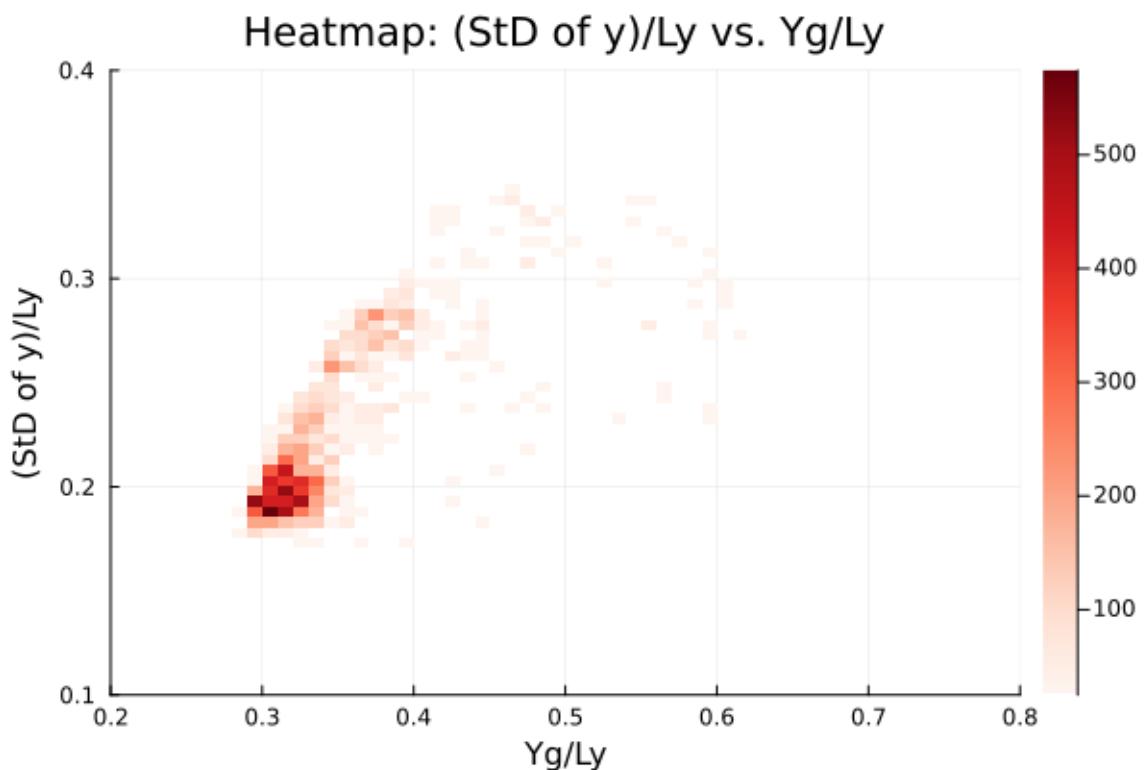
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.0$



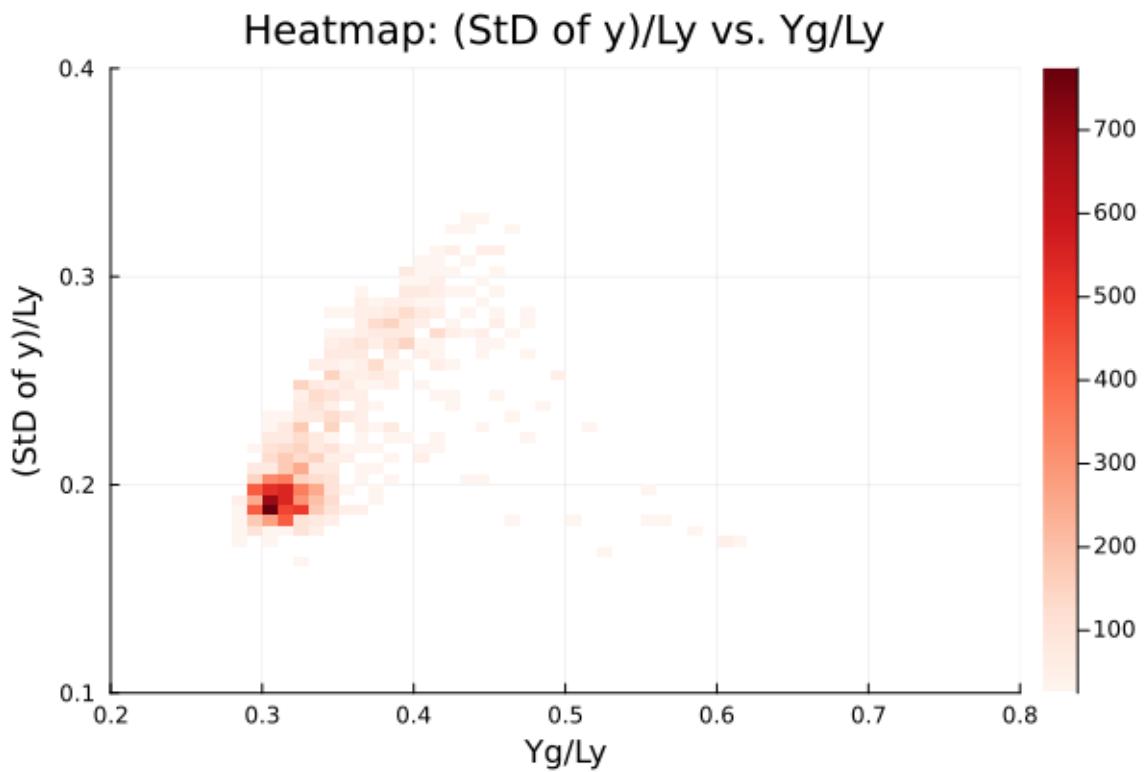
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.125$



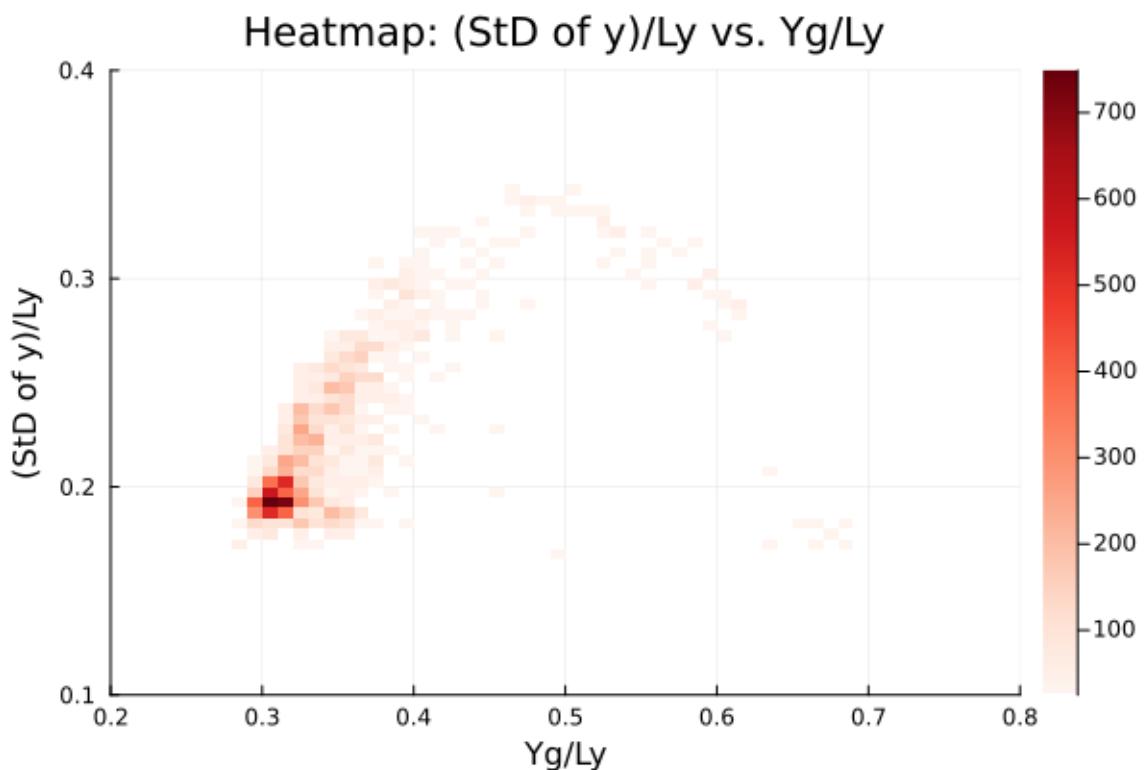
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.125$



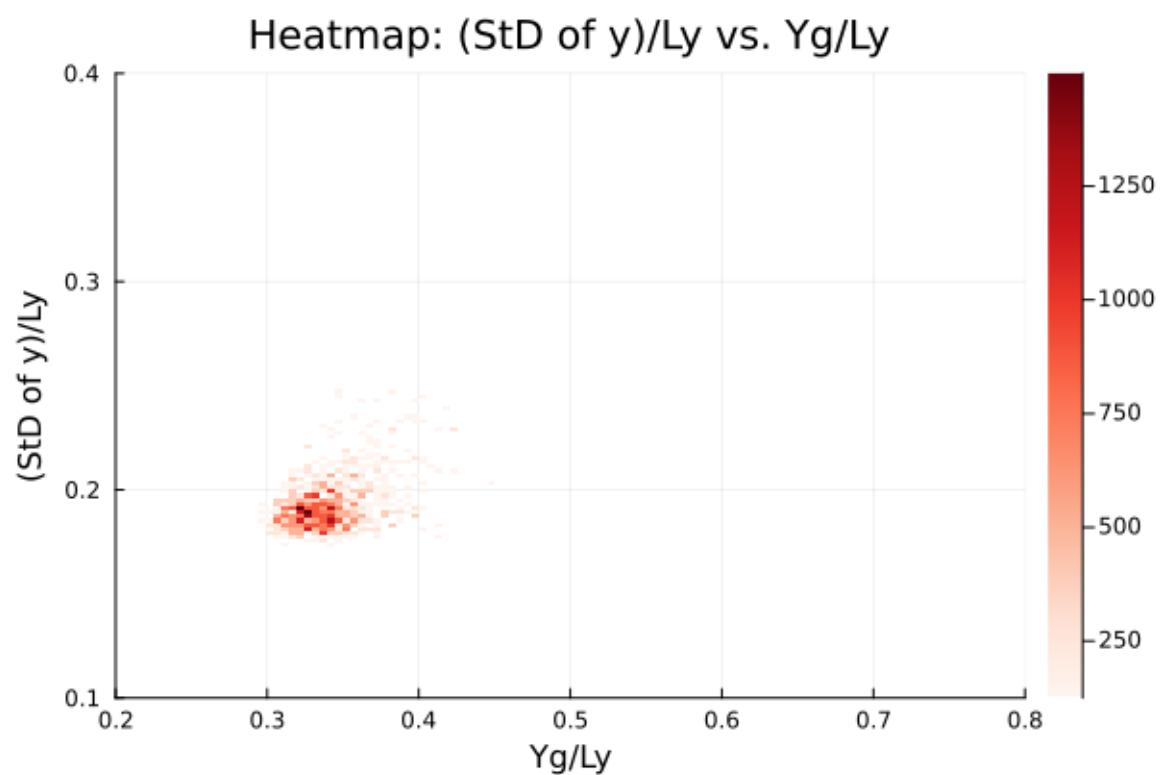
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.125$



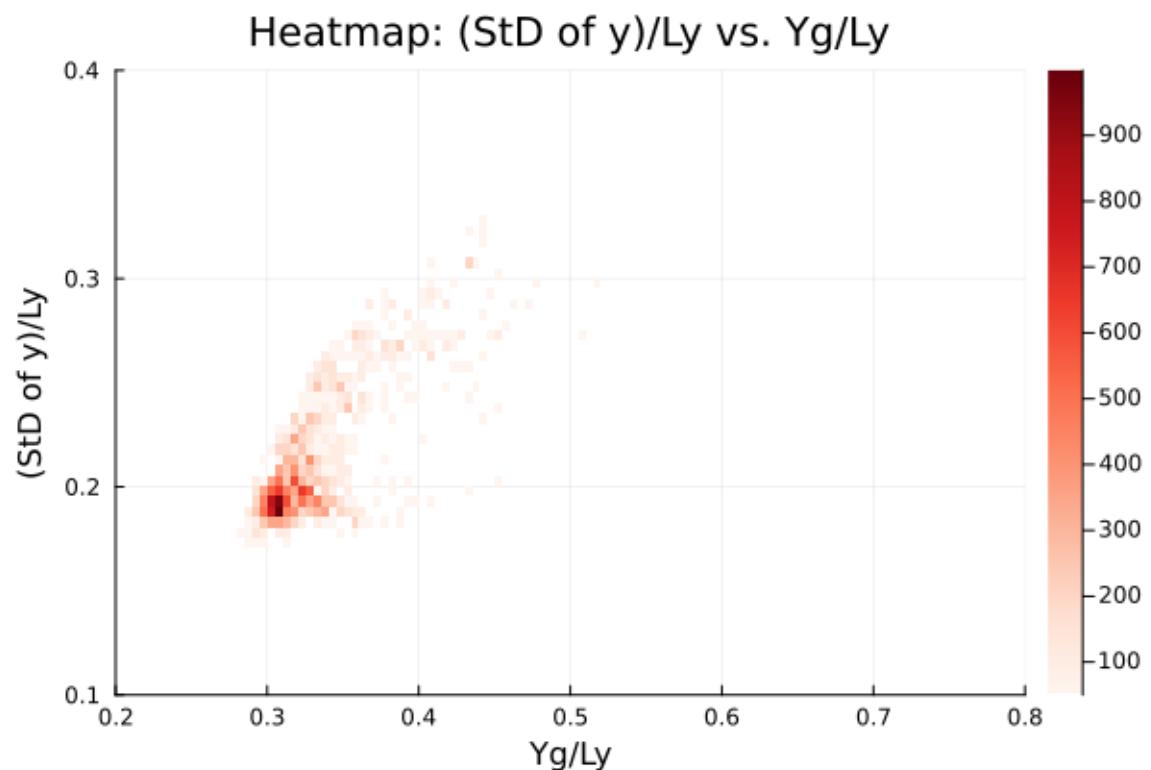
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.125$



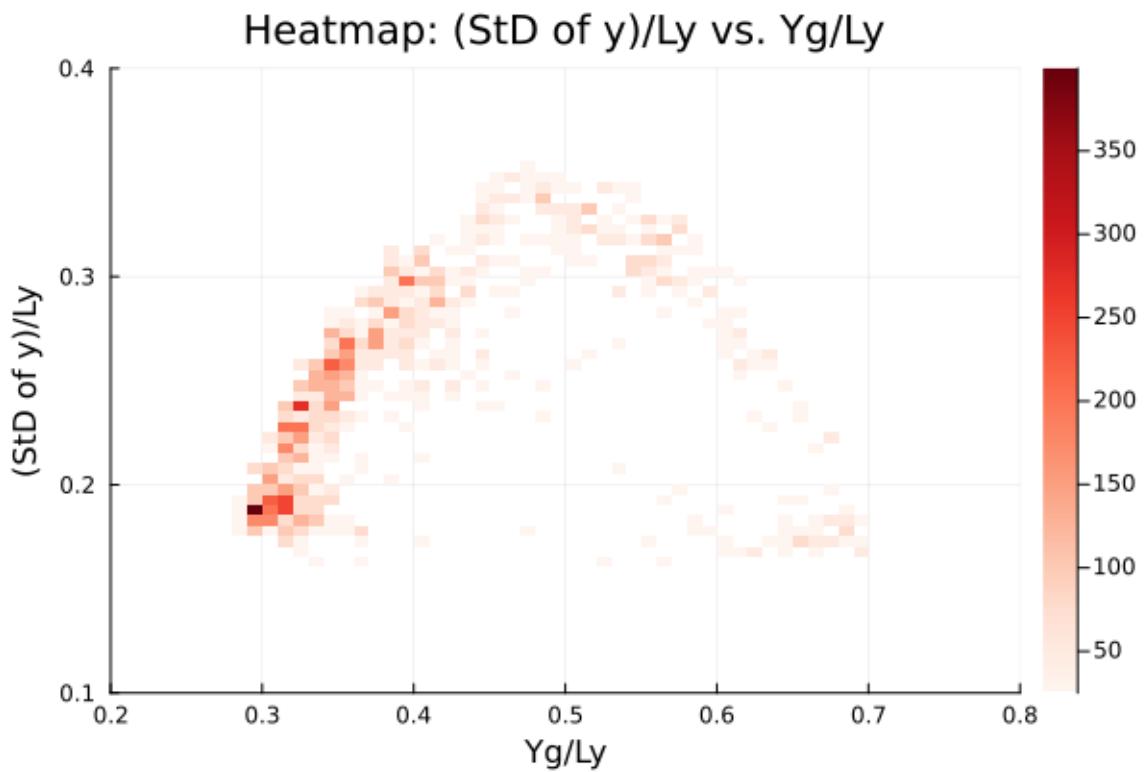
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.125$



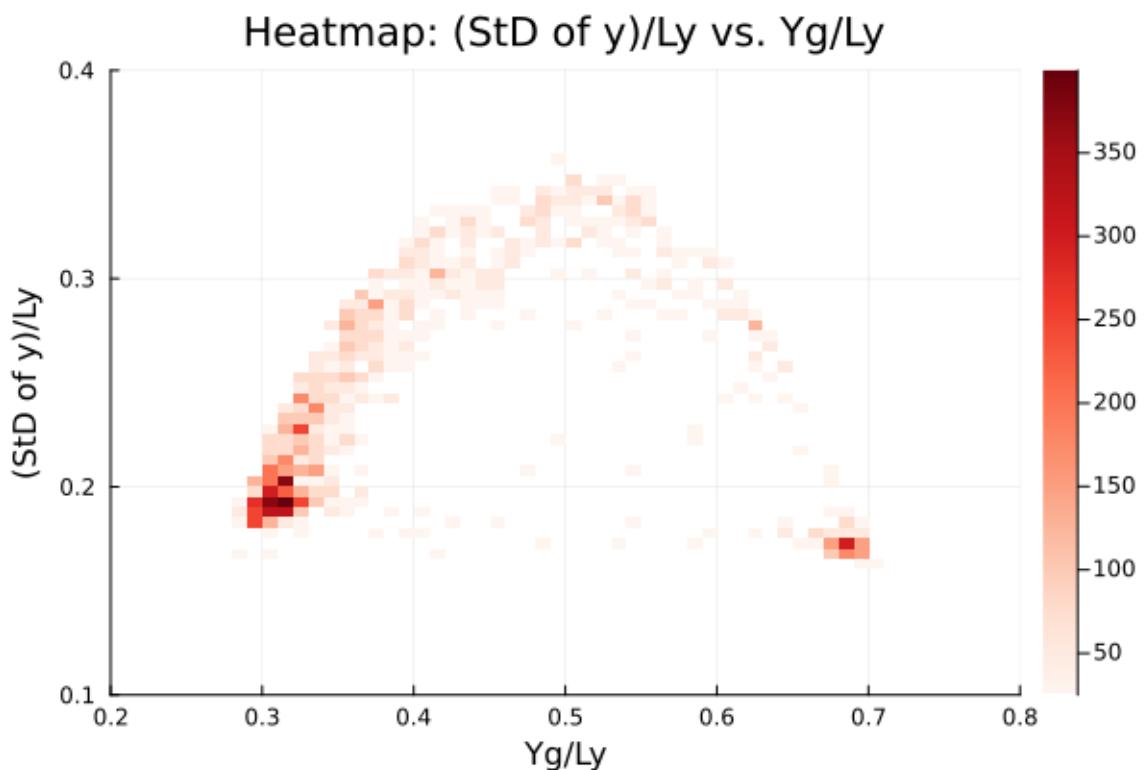
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.250$



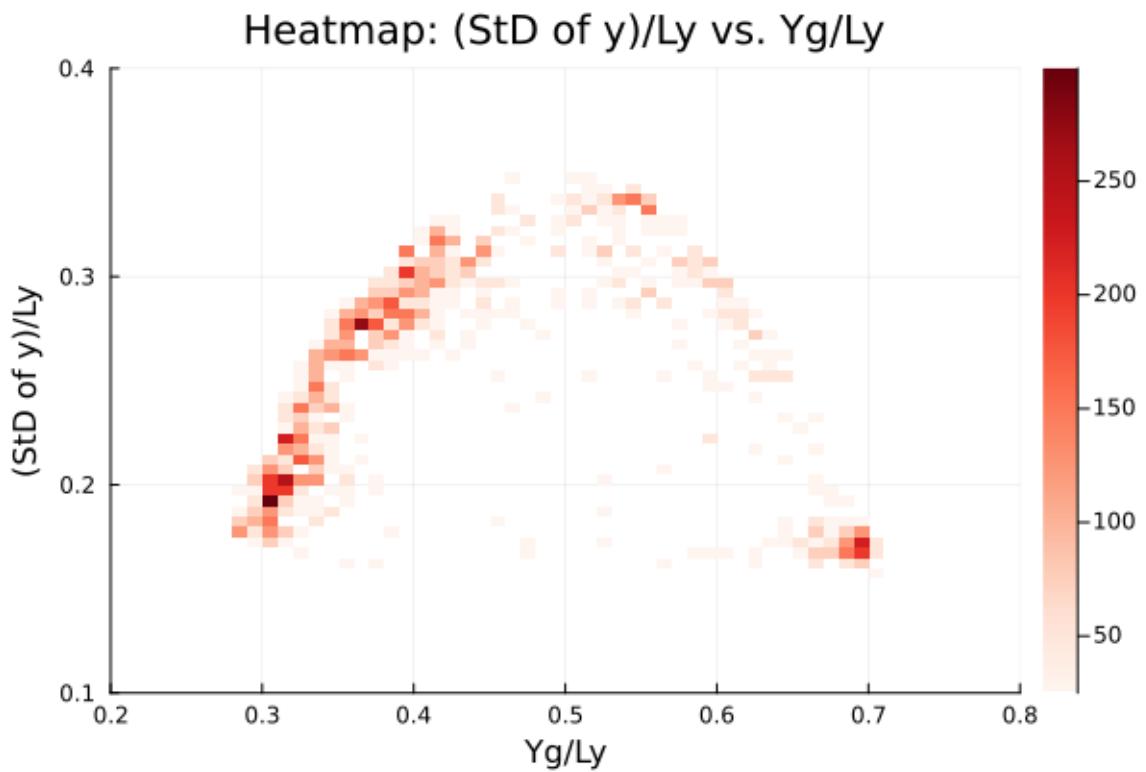
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.250$



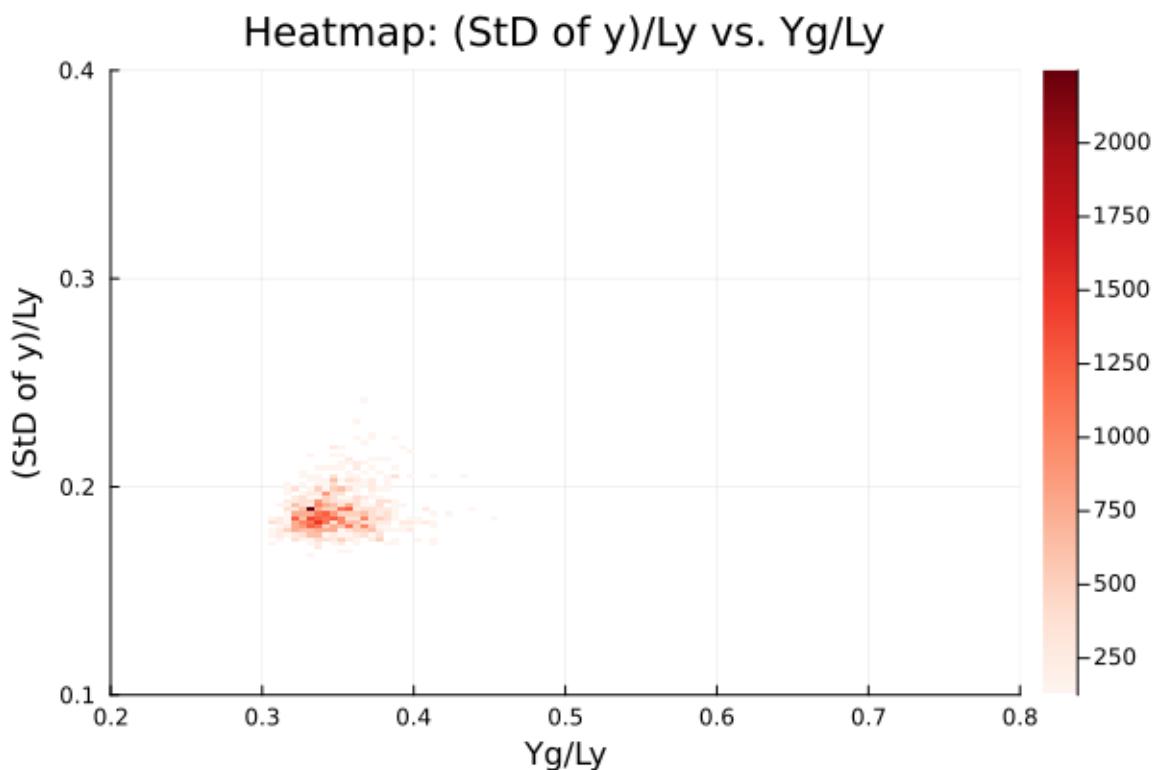
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.250$



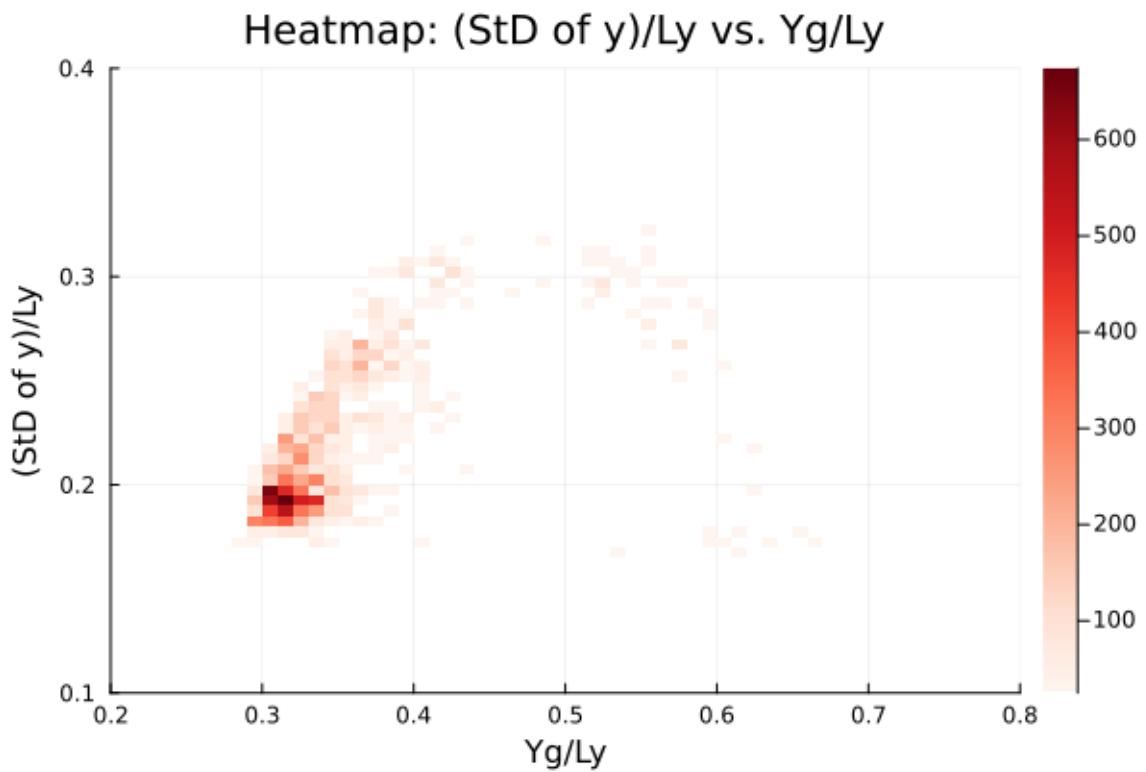
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.250$



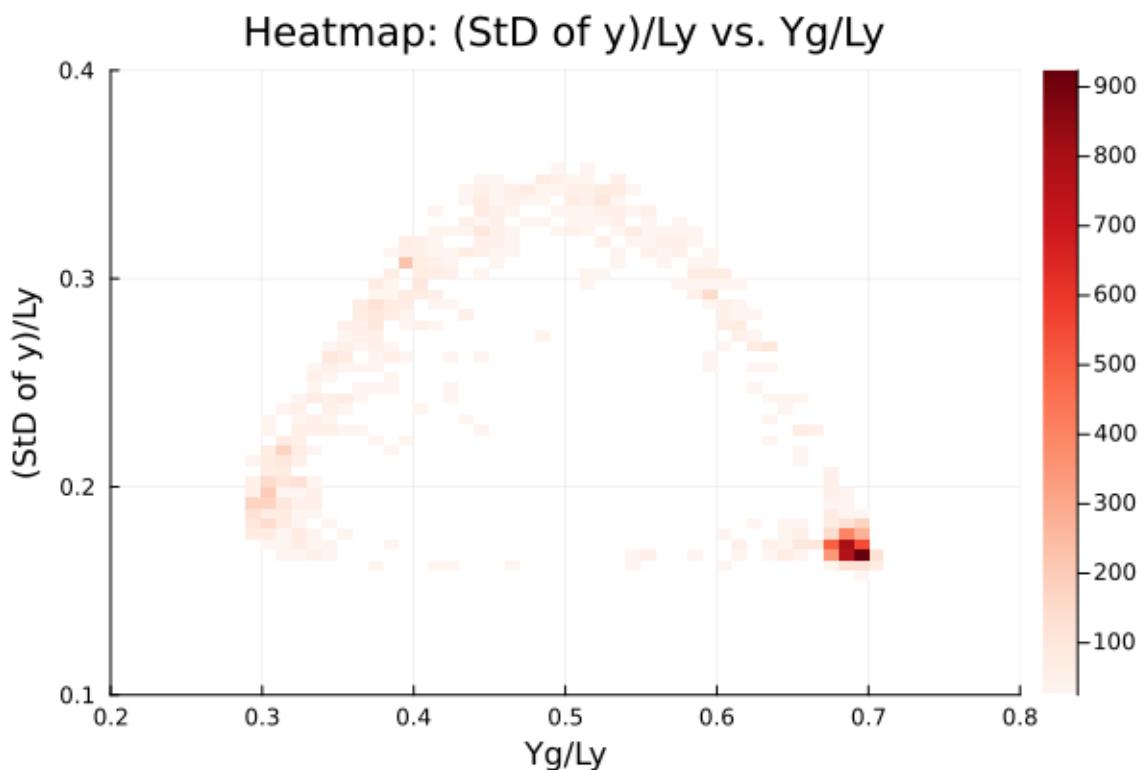
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.250$



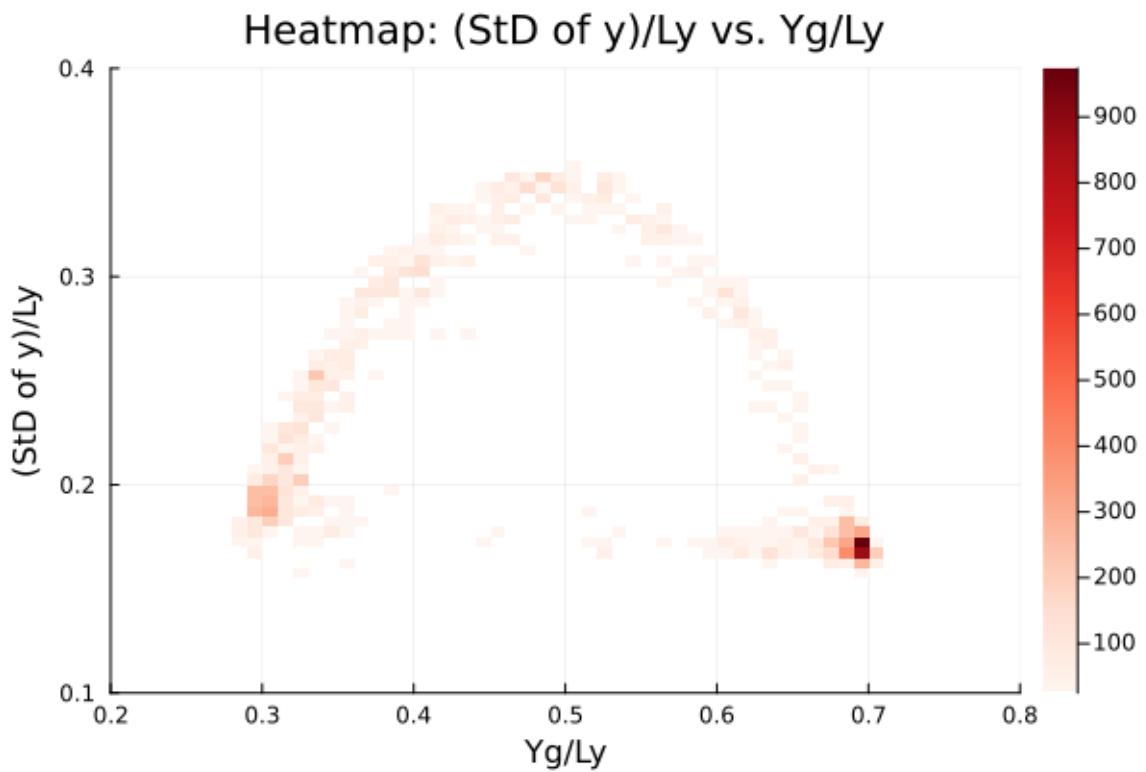
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.0$, $R_t = 0.375$



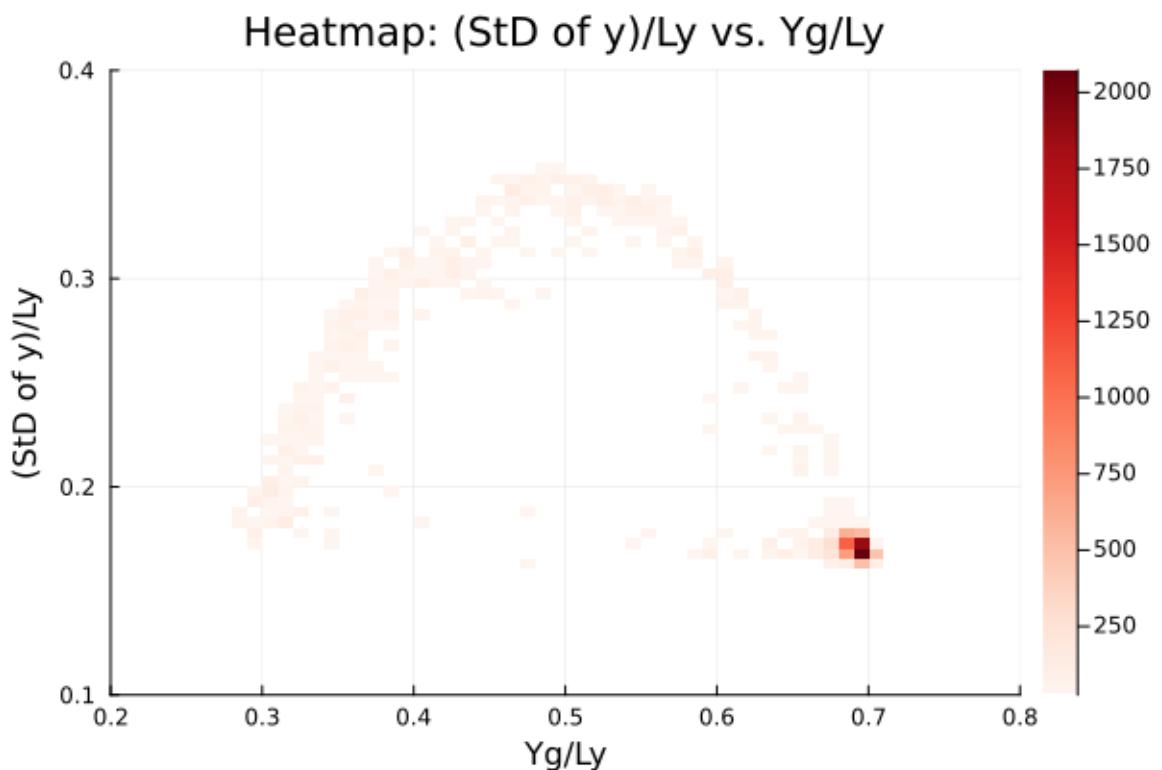
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.375$



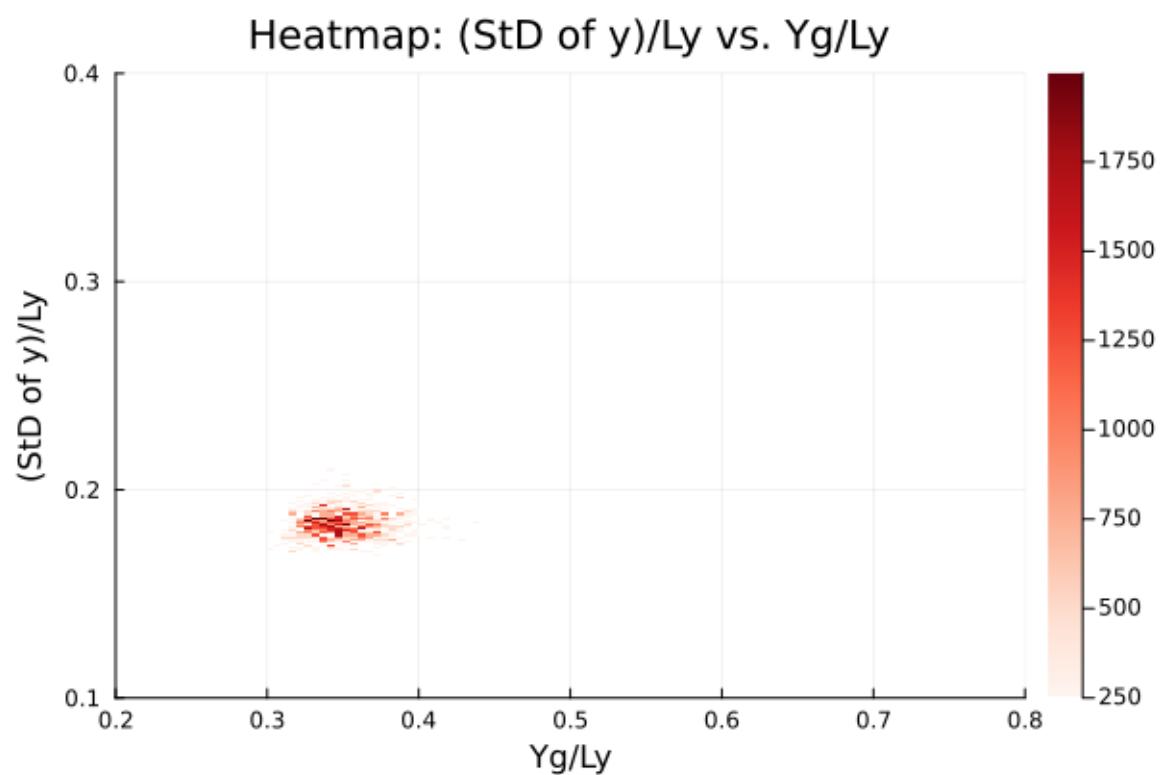
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.375$



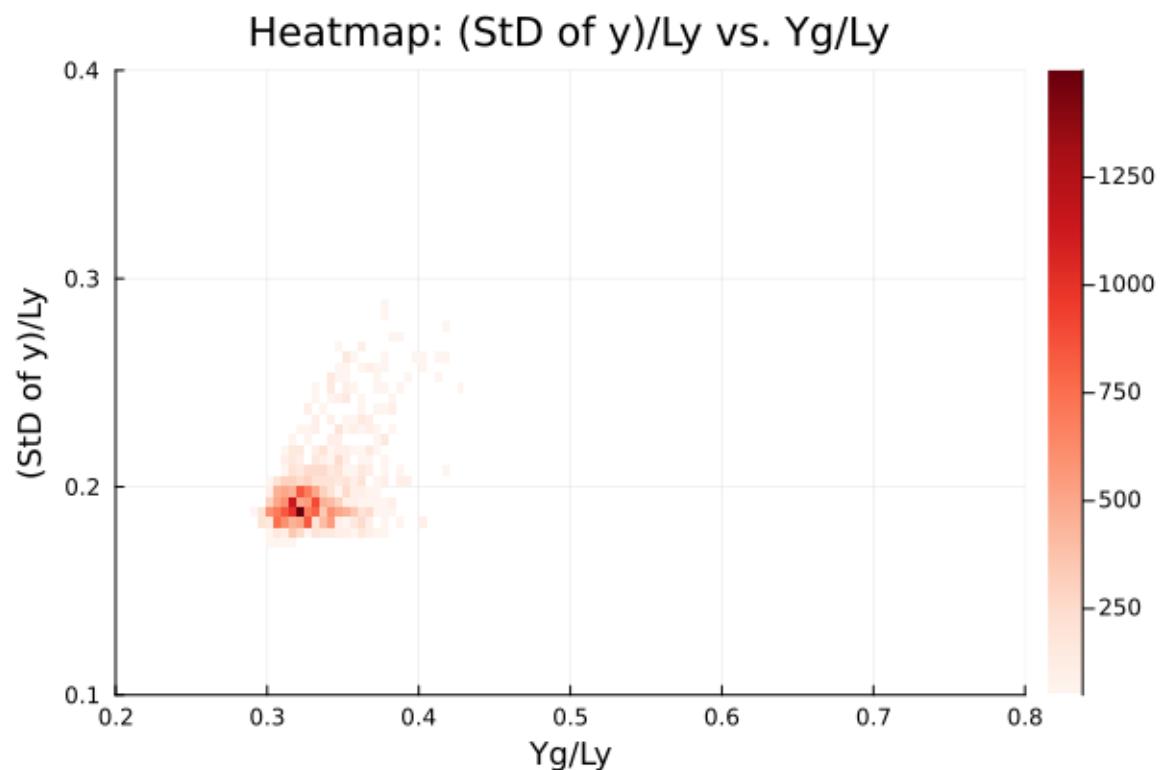
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.375$



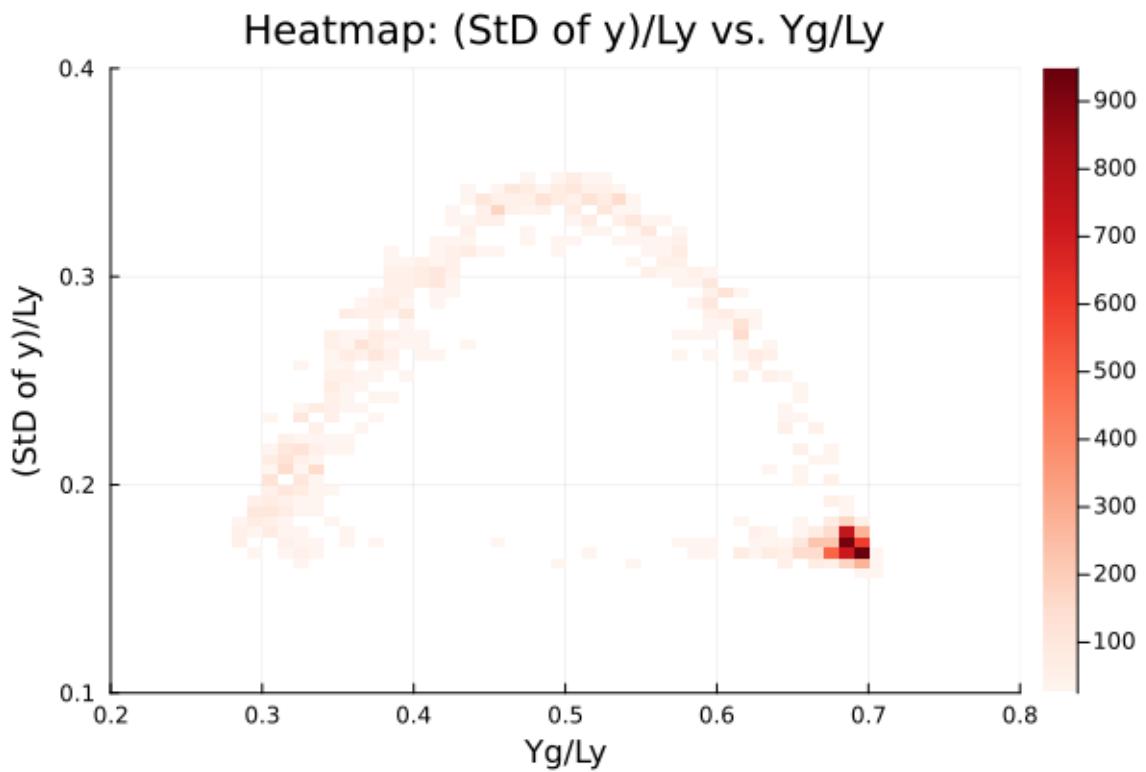
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.375$



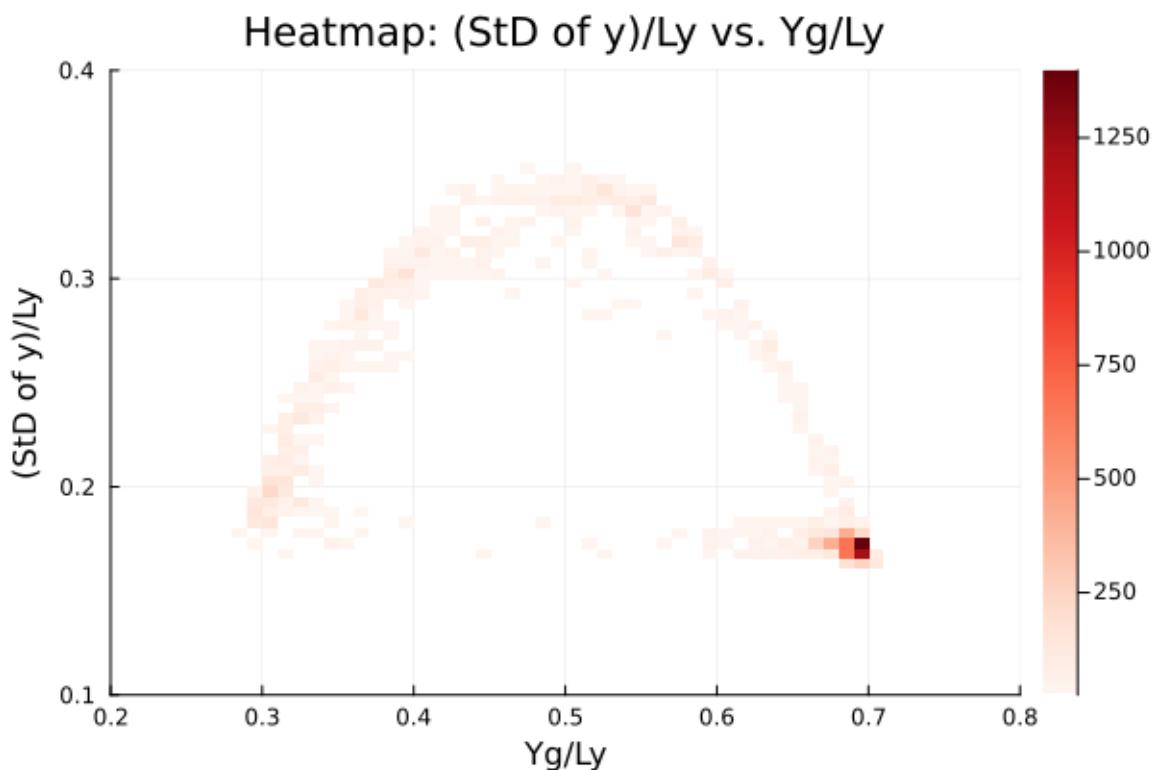
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.500$



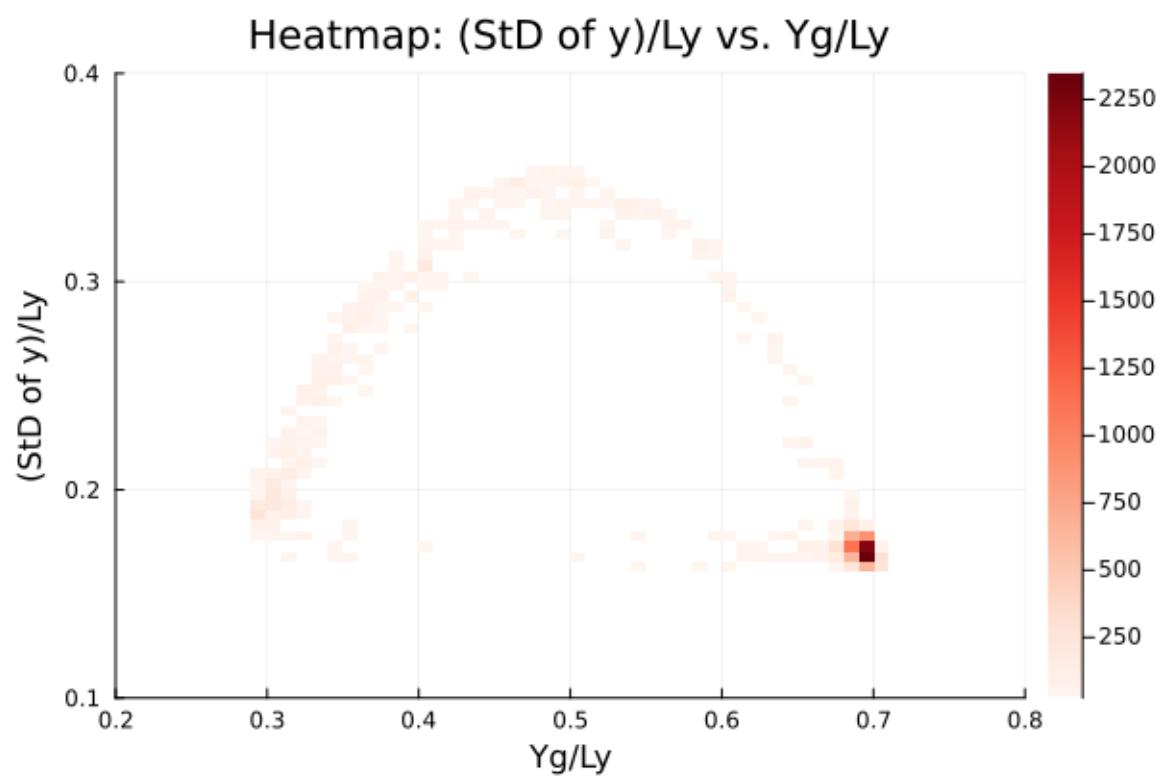
(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.500$



(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.500$



(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.500$



(a) 重力と熱流を同時にかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.500$

A.5.2 重力を先にかけて、熱流を後からかける

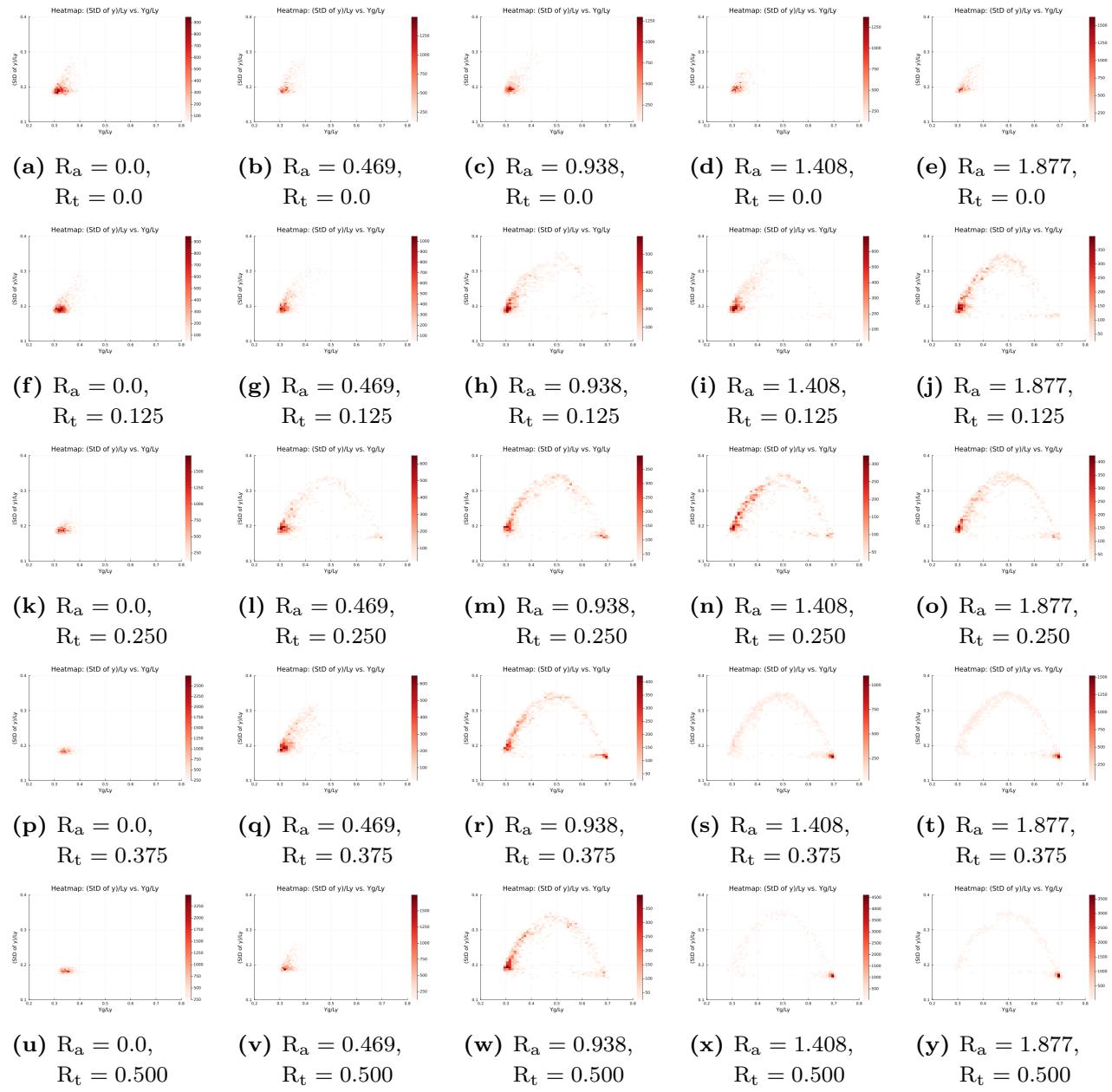


図 A.55: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

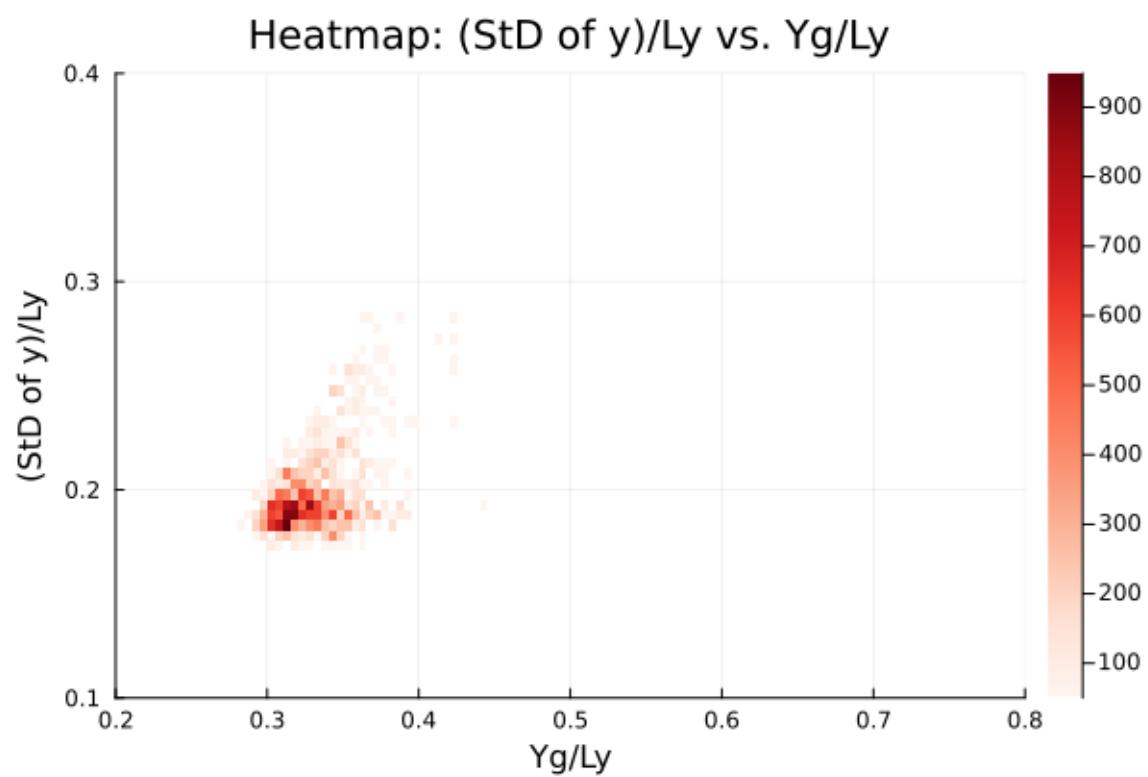


図 A.56: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

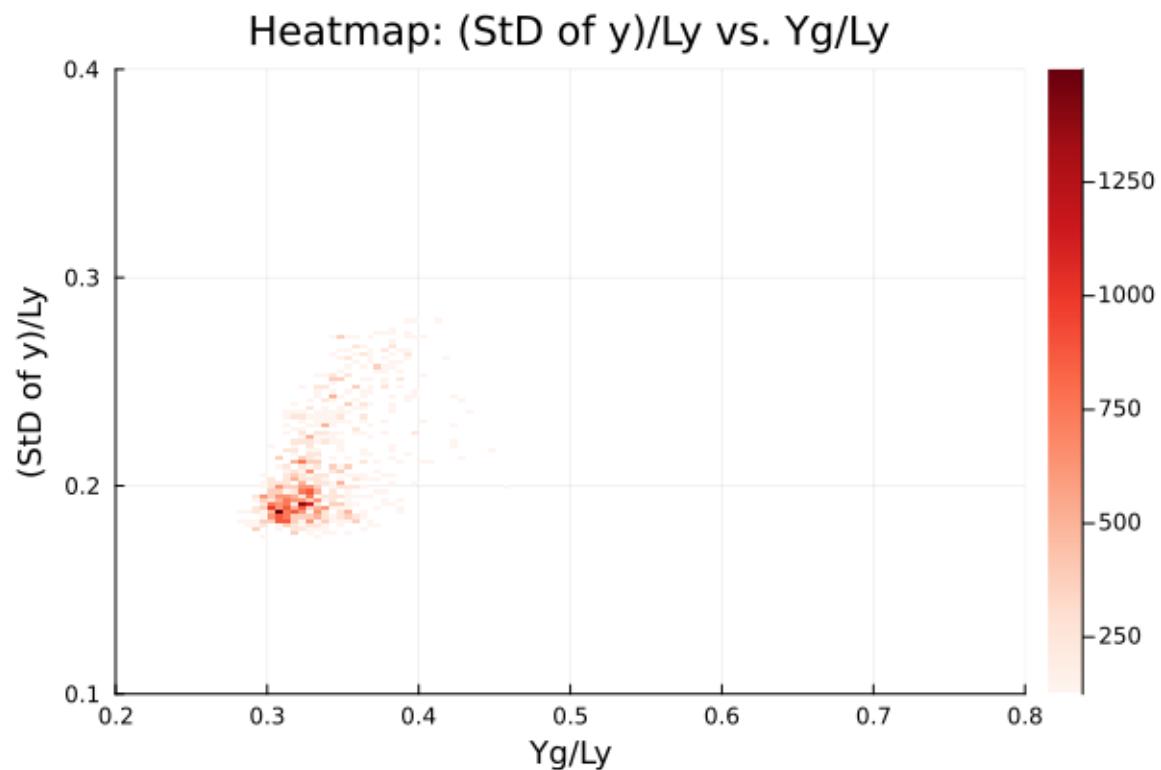


図 A.57: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.0$

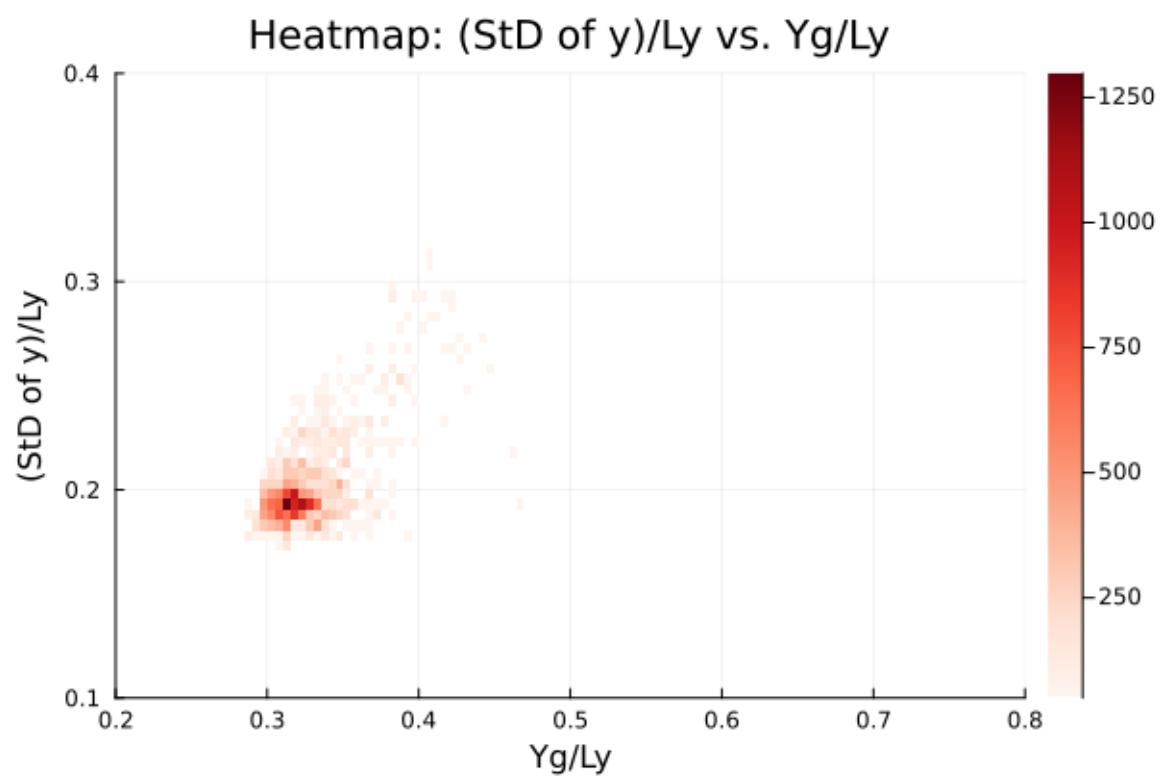


図 A.58: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.0$

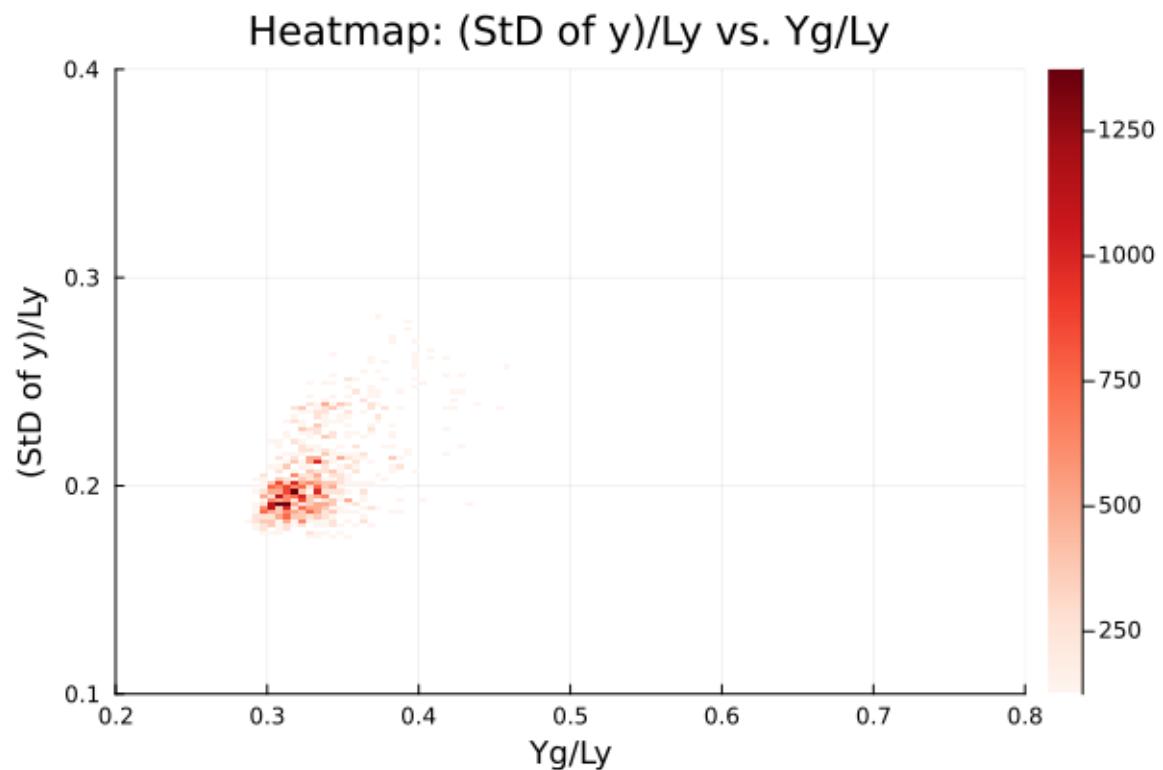


図 A.59: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.0$

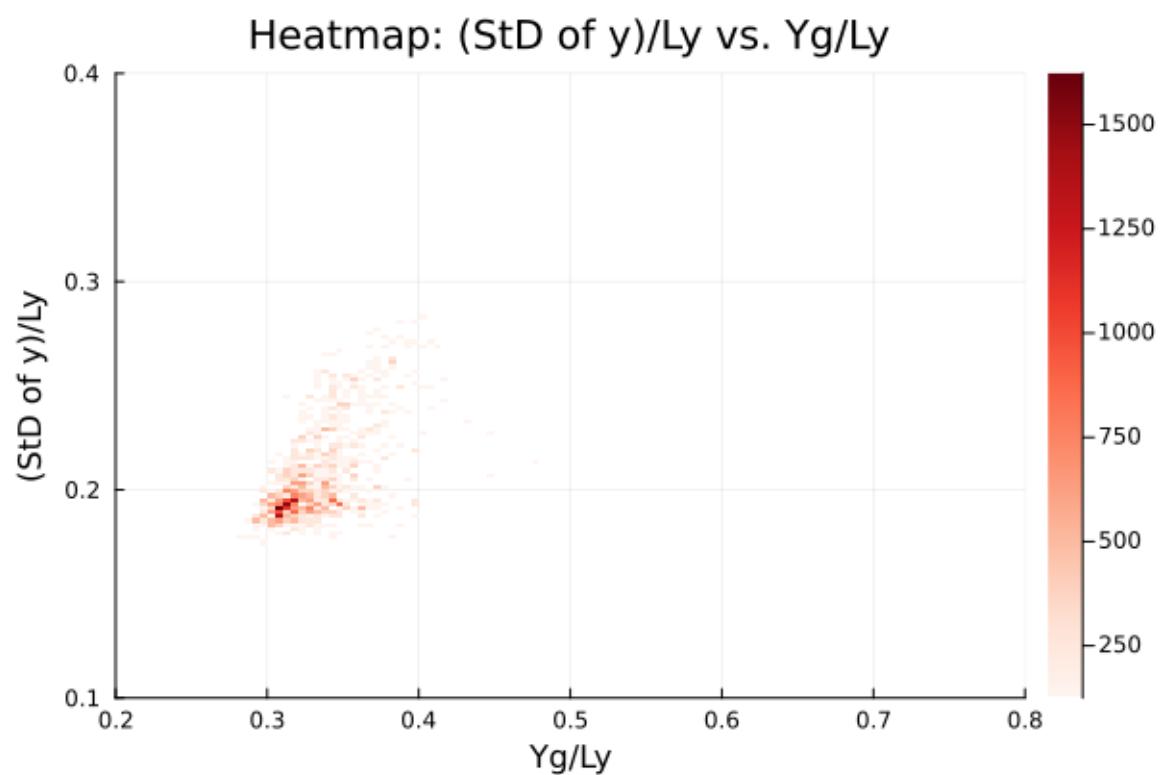


図 A.60: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.0$

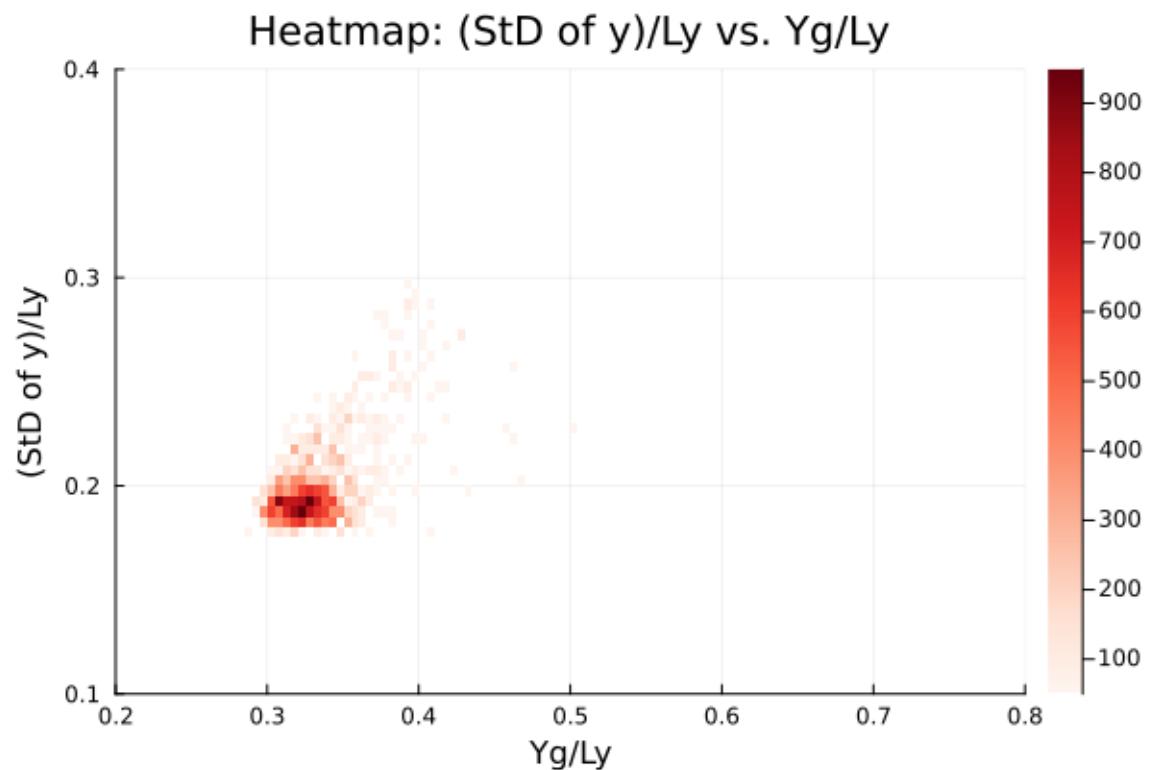


図 A.61: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.125$

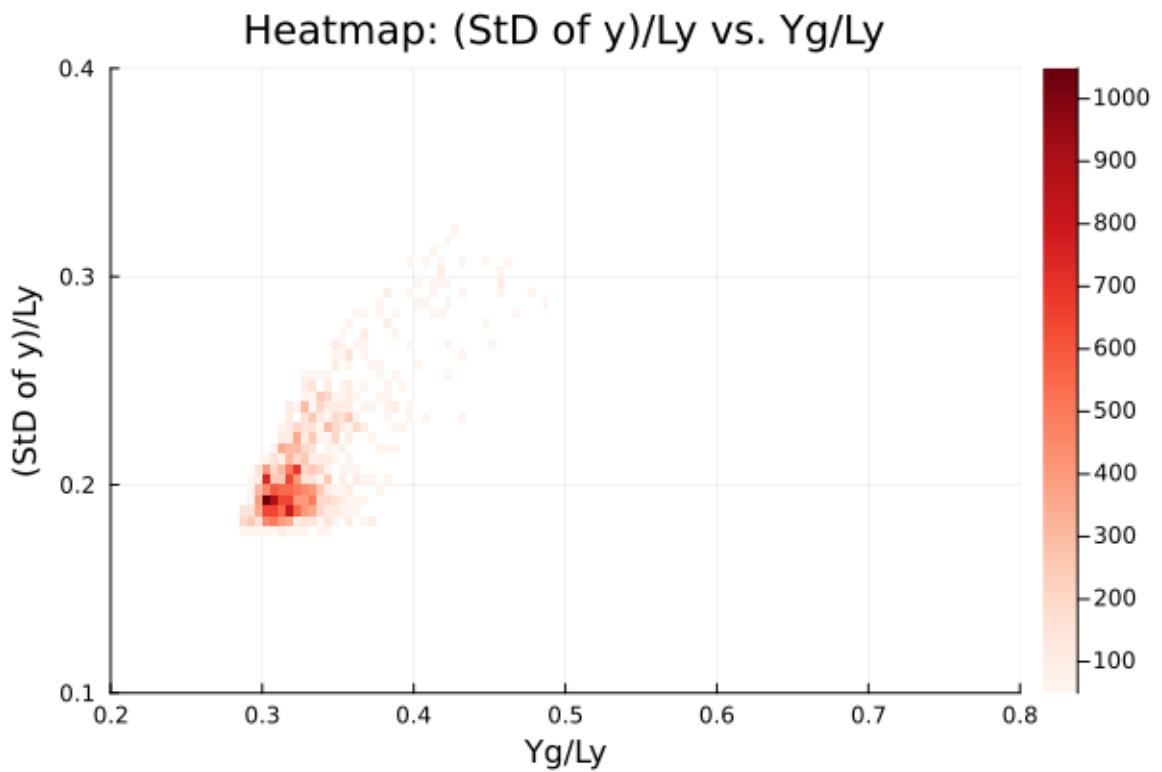


図 A.62: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.125$

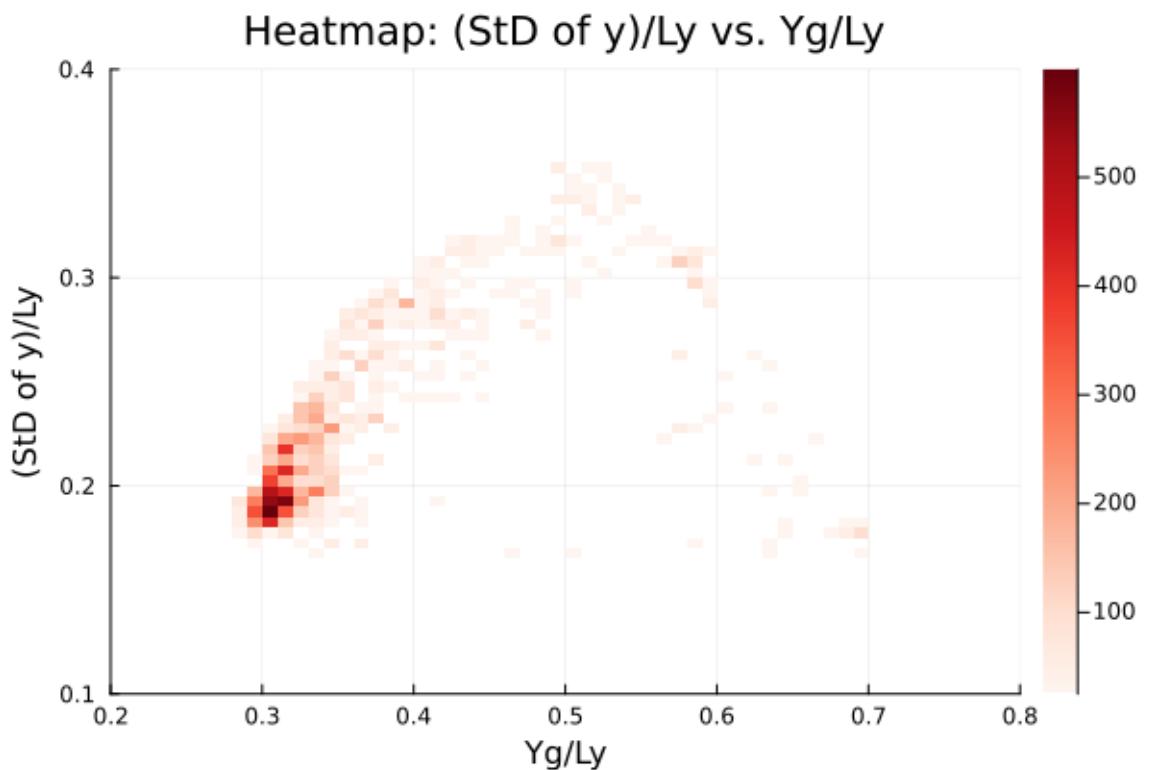


図 A.63: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.125$

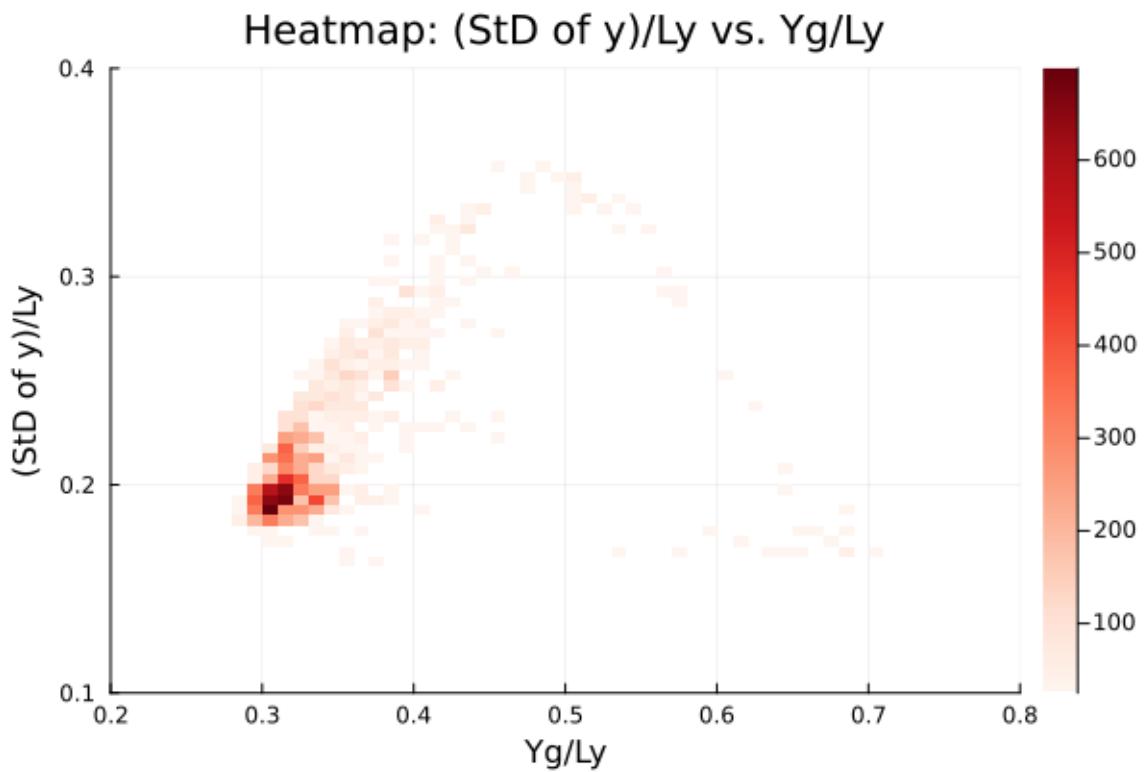


図 A.64: 重力を先にかけて, 熱流を後からかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.125$

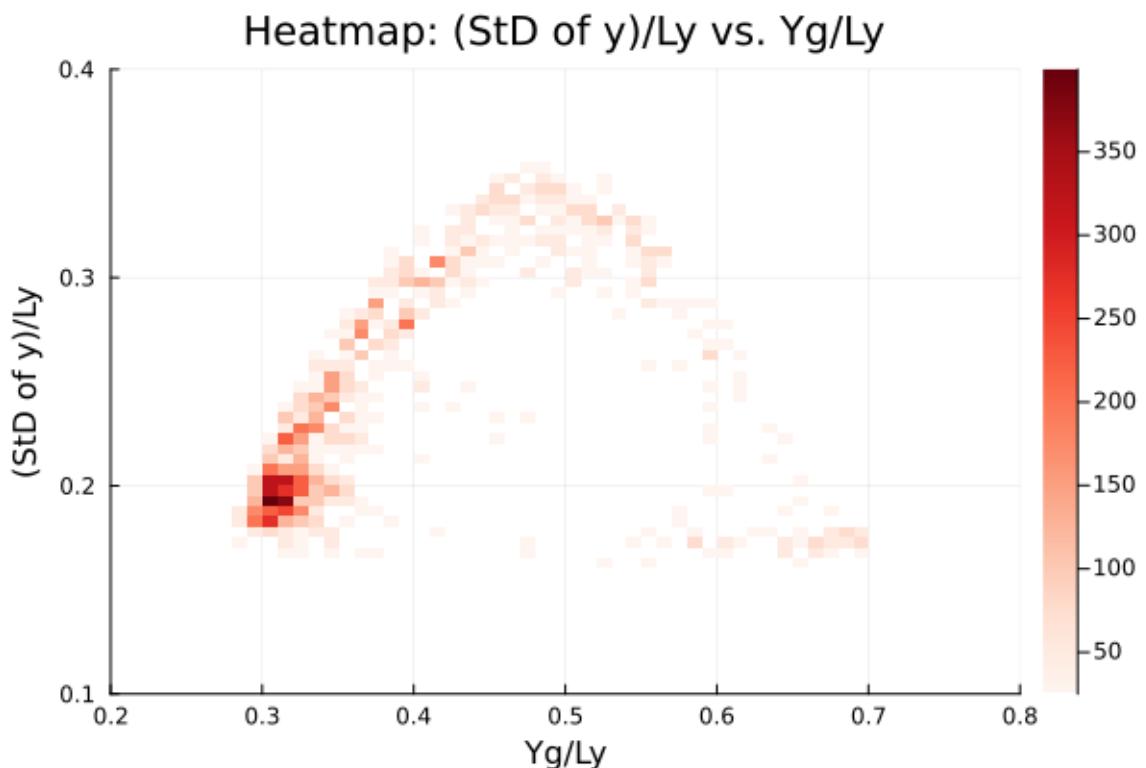


図 A.65: 重力を先にかけて, 熱流を後からかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.125$

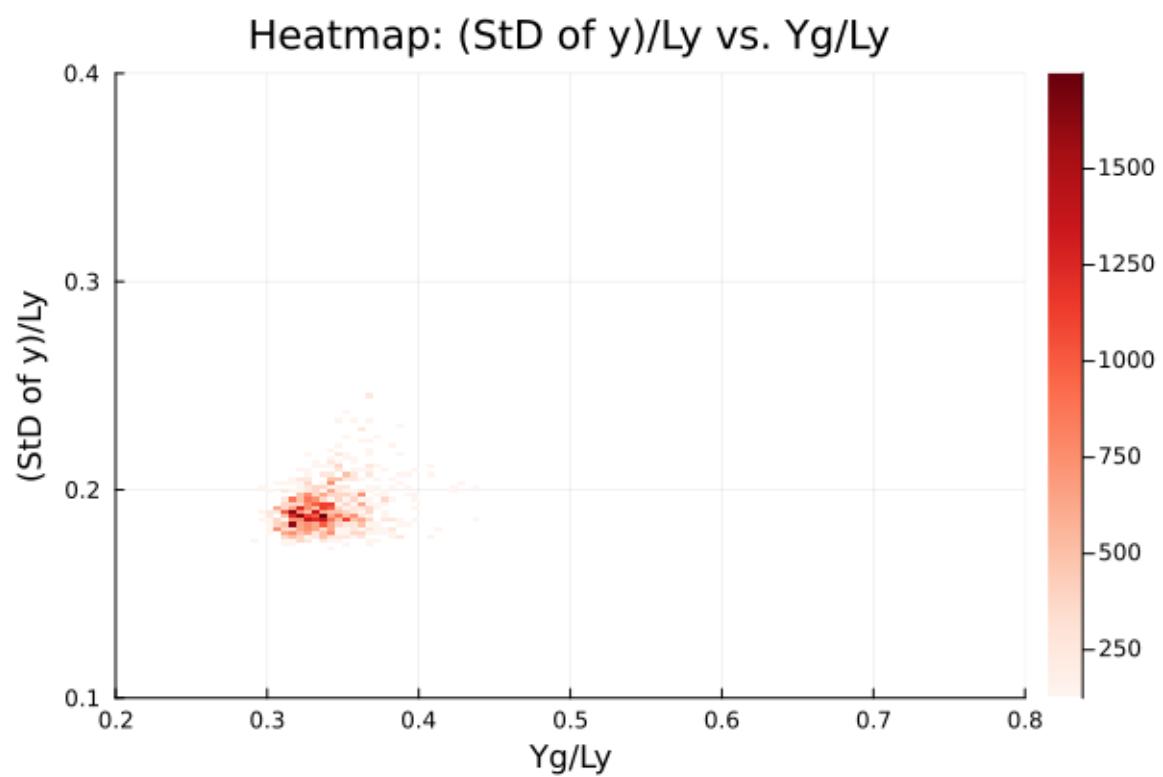


図 A.66: 重力を先にかけて, 熱流を後からかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.250$

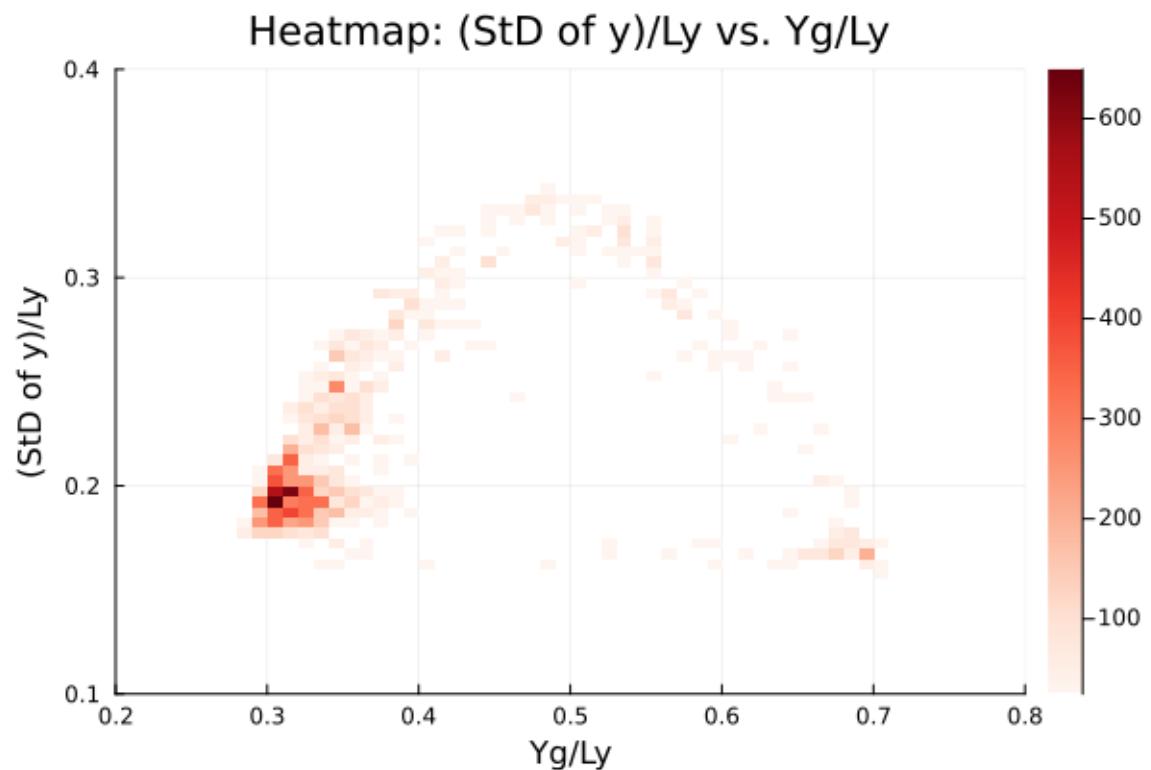


図 A.67: 重力を先にかけて, 熱流を後からかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.250$

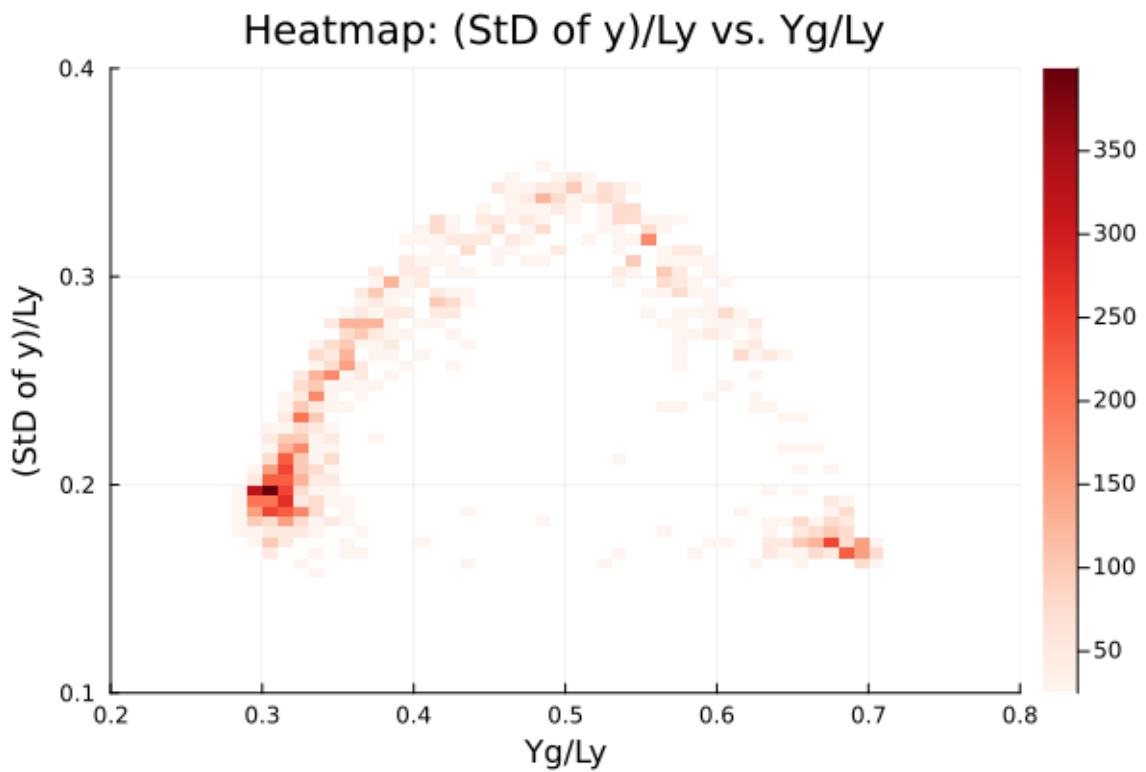


図 A.68: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.250$

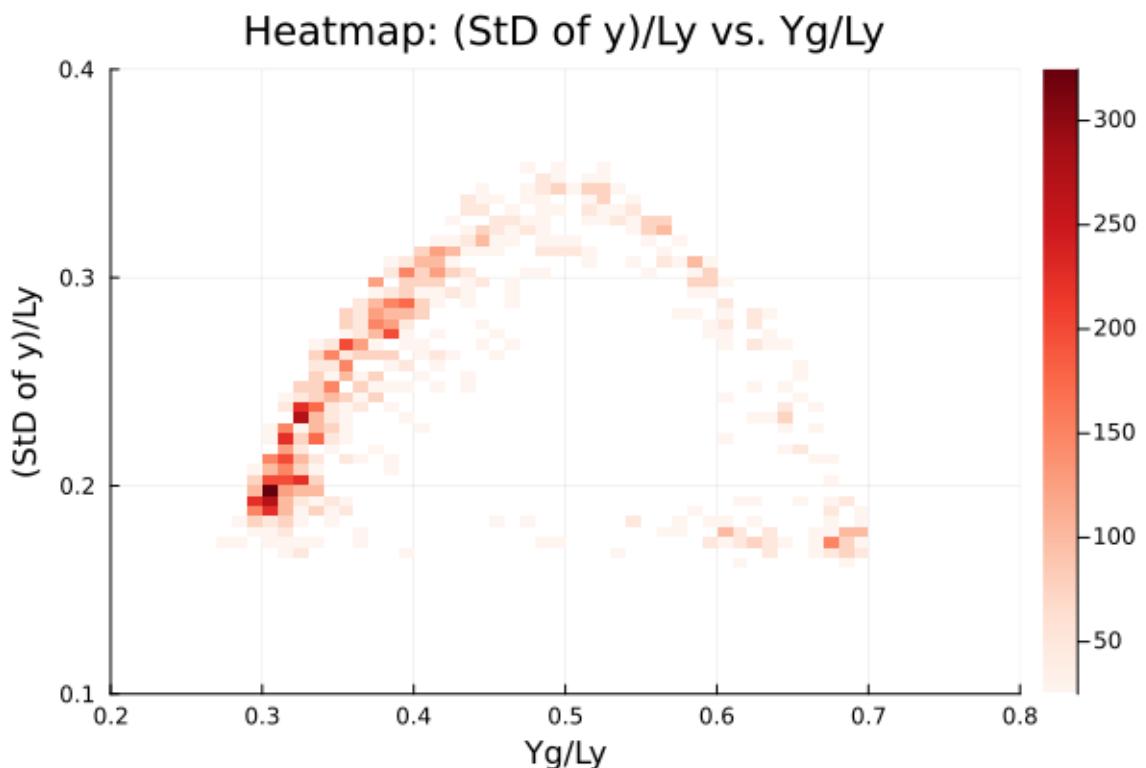


図 A.69: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.250$

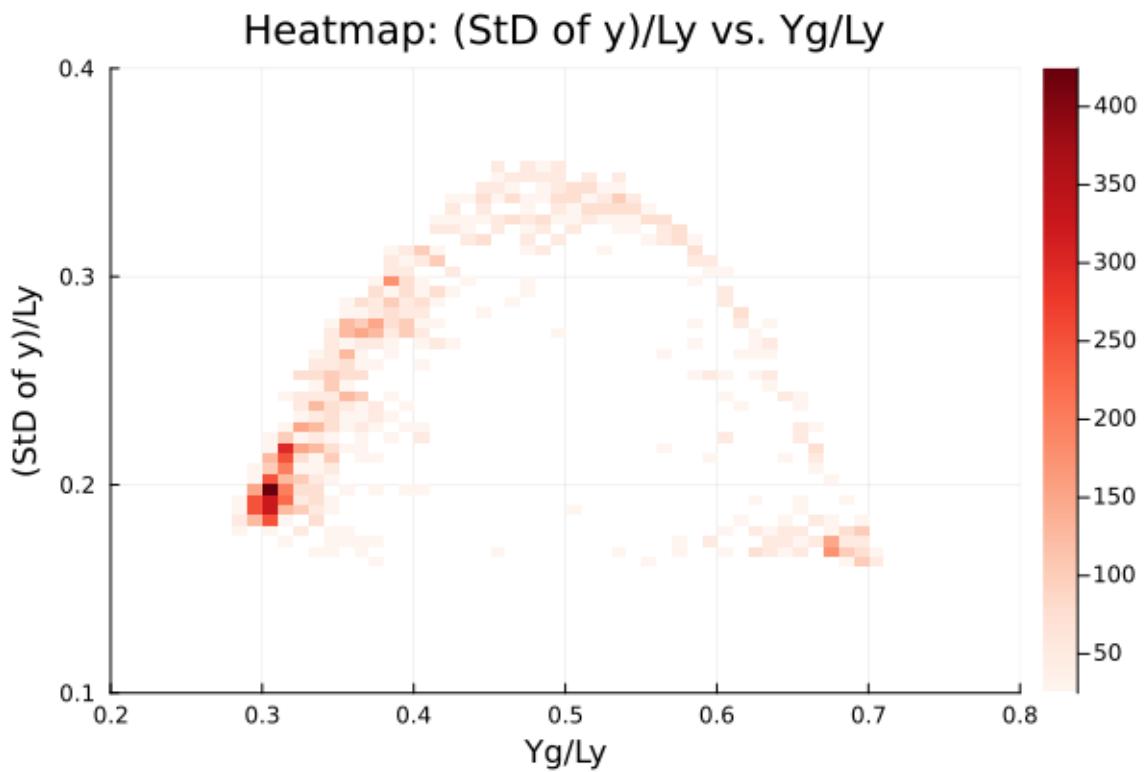


図 A.70: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.250$

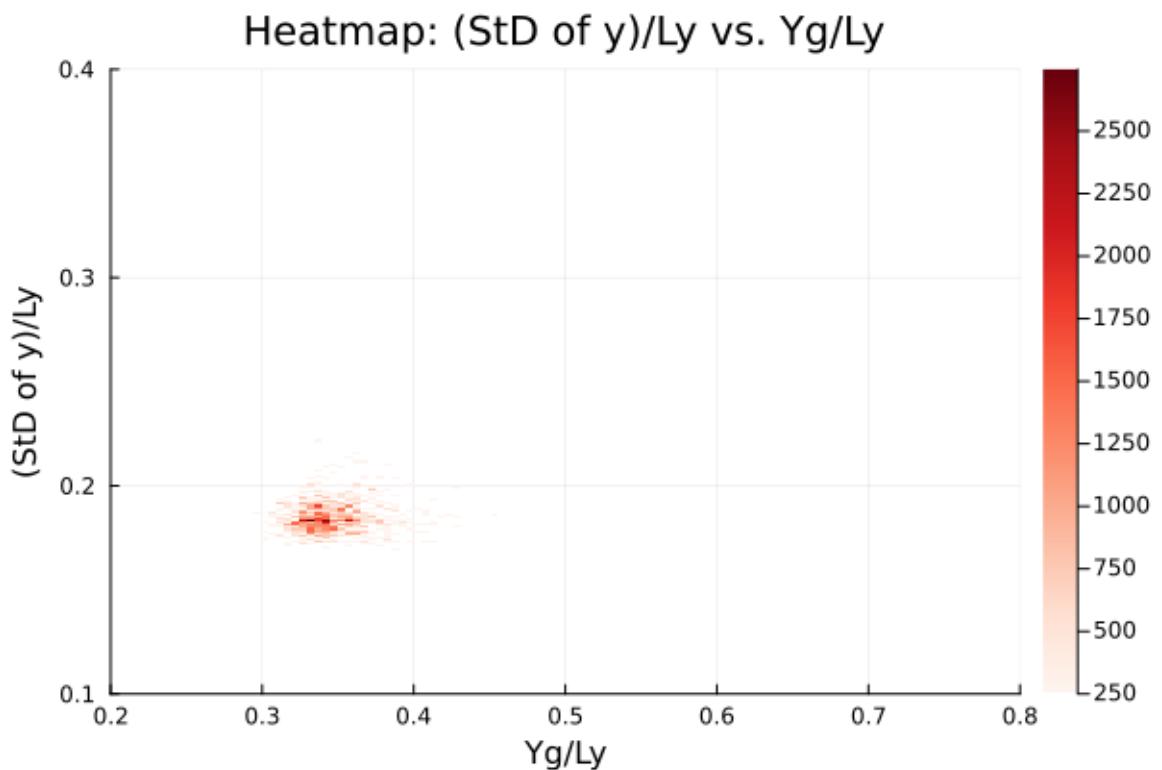


図 A.71: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.0$, $R_t = 0.375$

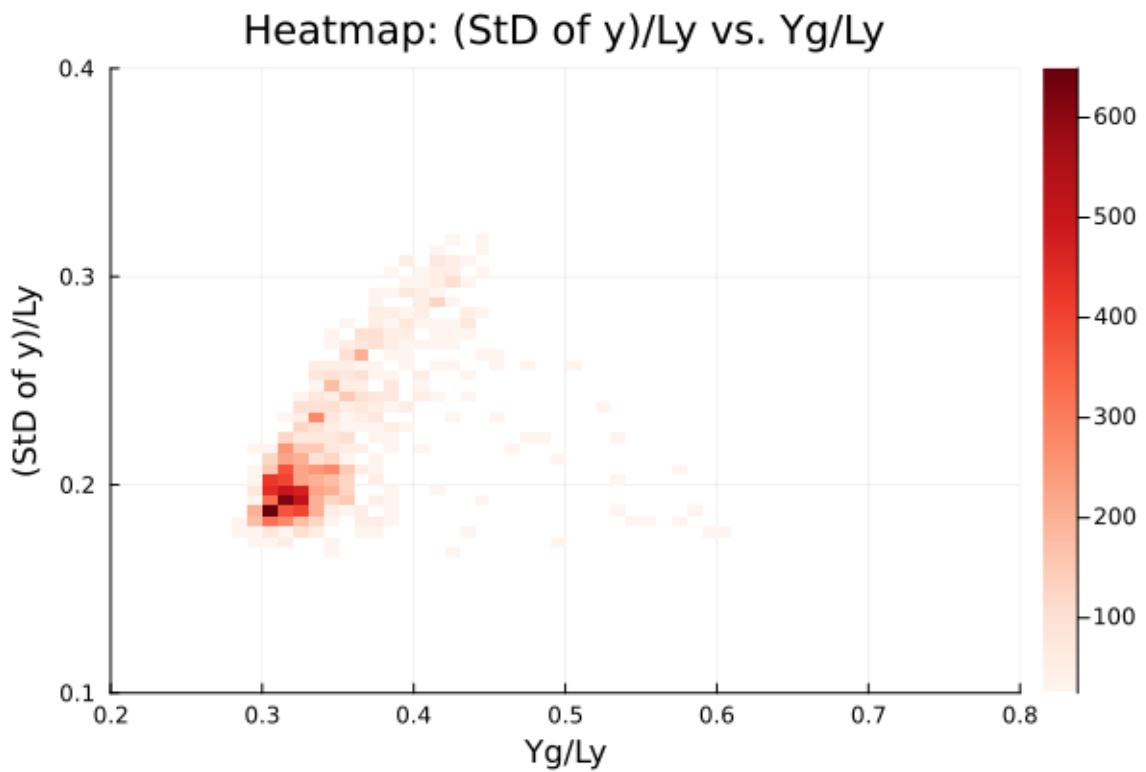


図 A.72: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.375$

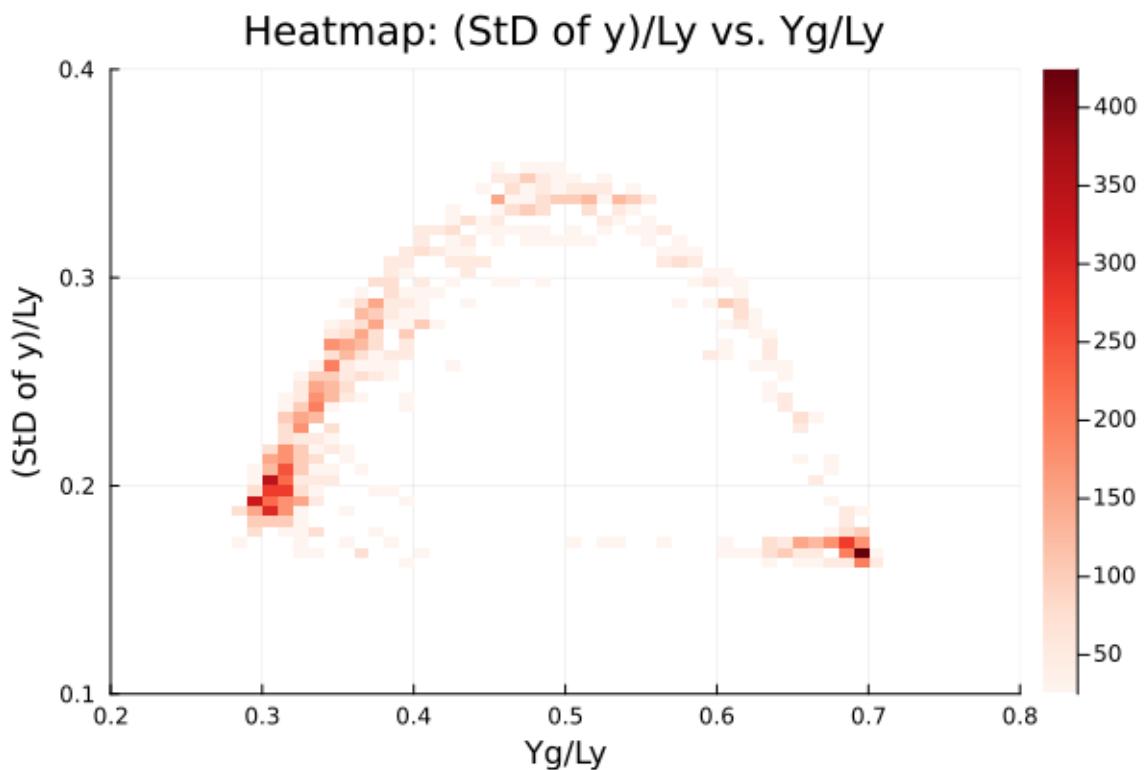


図 A.73: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.375$

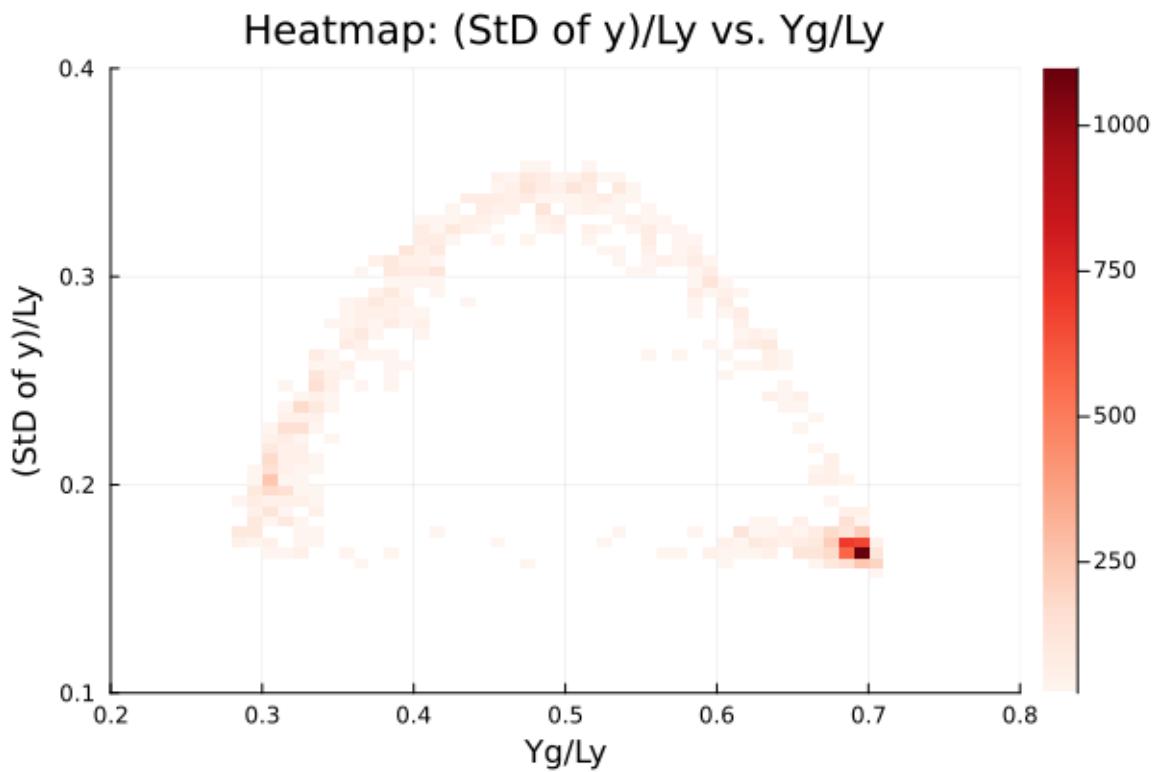


図 A.74: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.375$

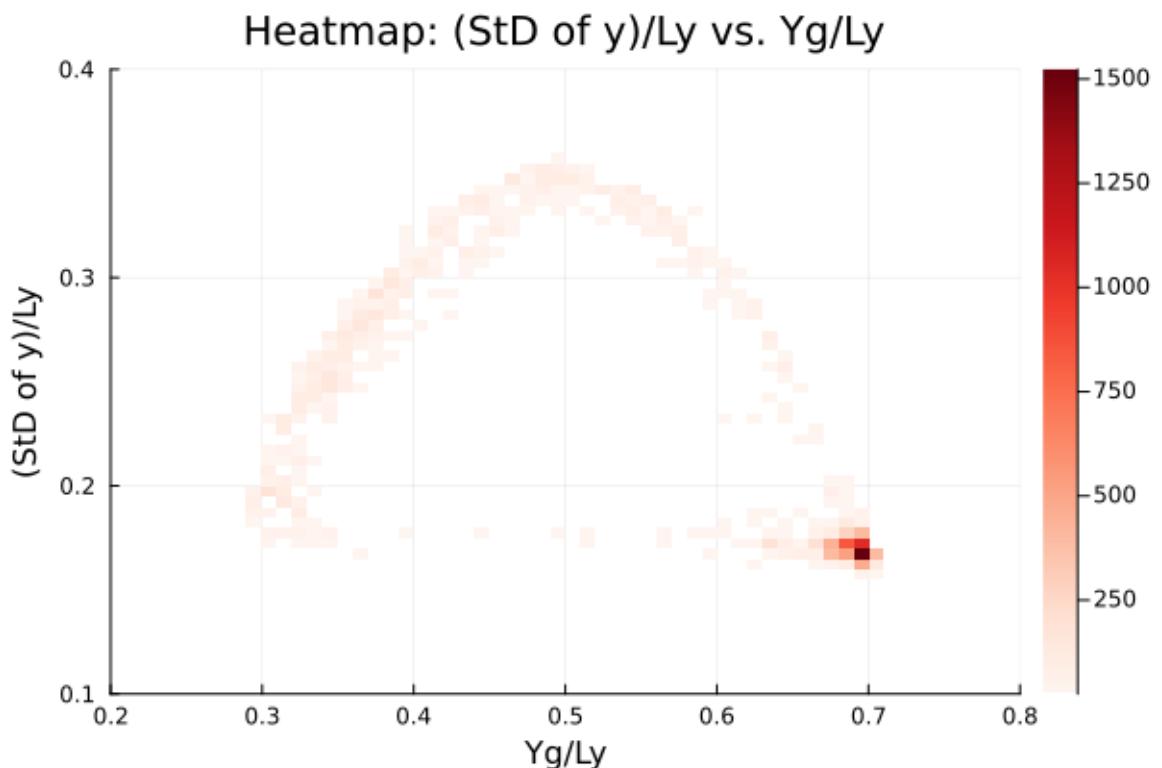


図 A.75: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.375$

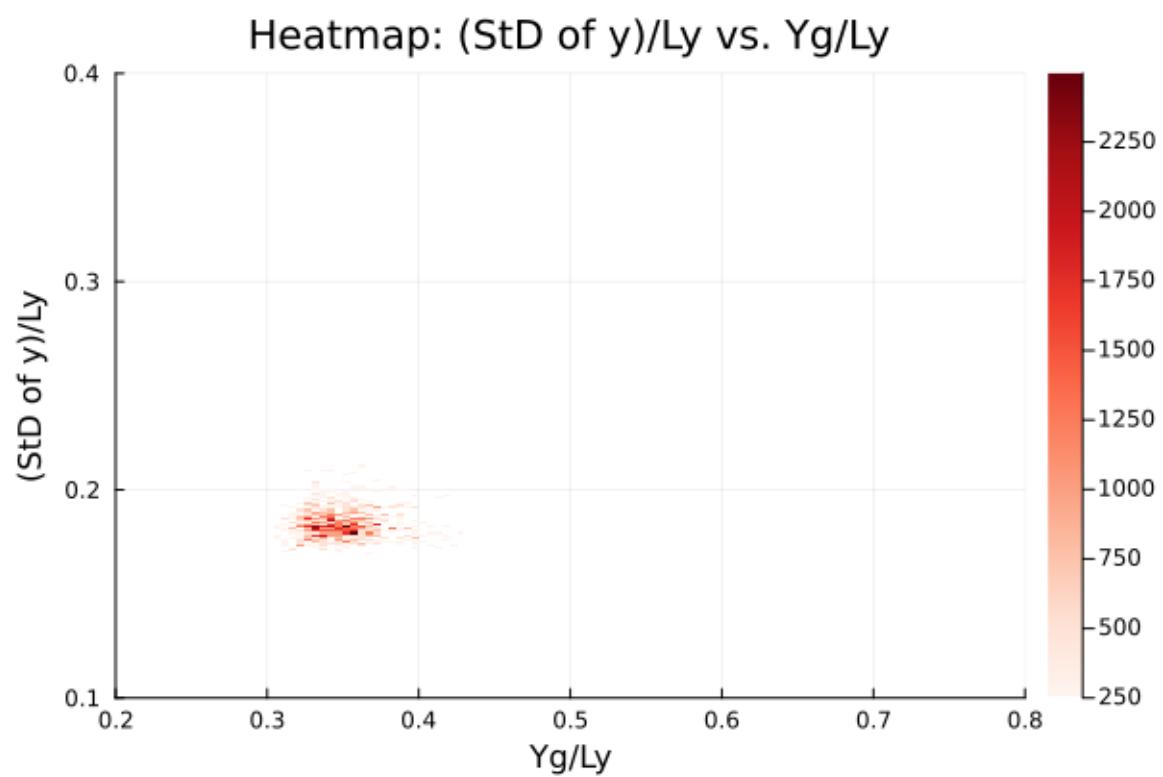


図 A.76: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.500$

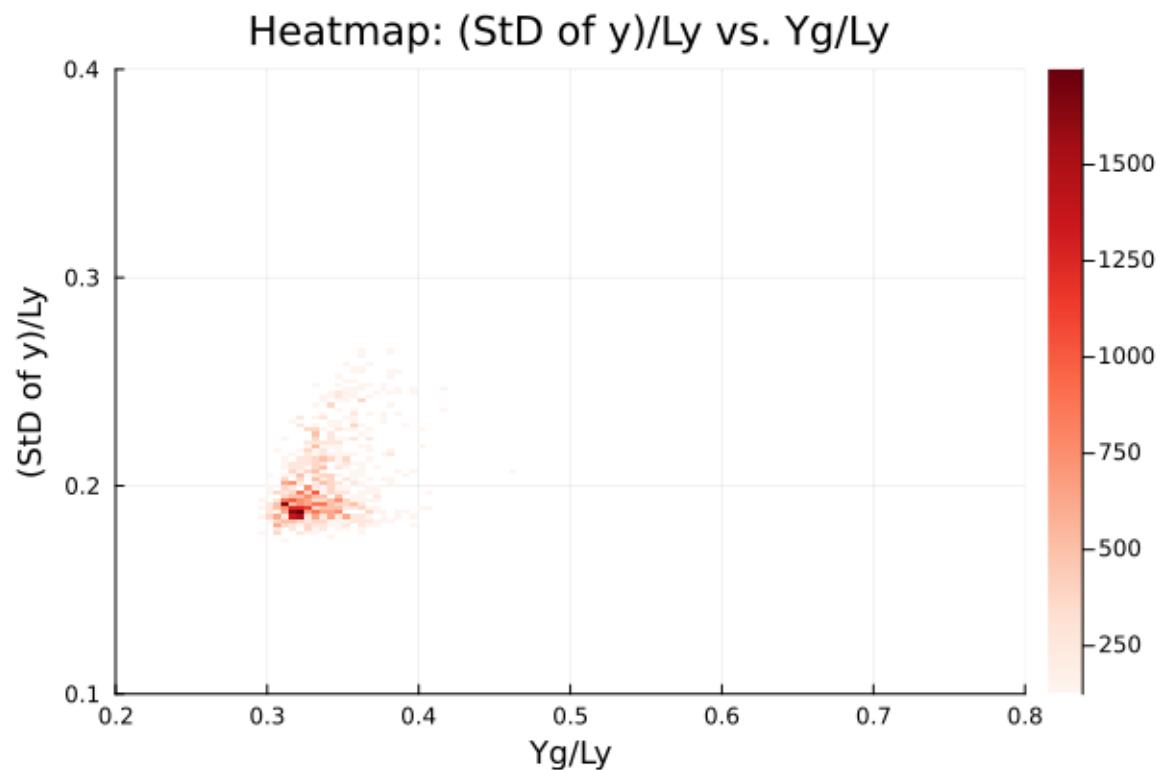


図 A.77: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.500$

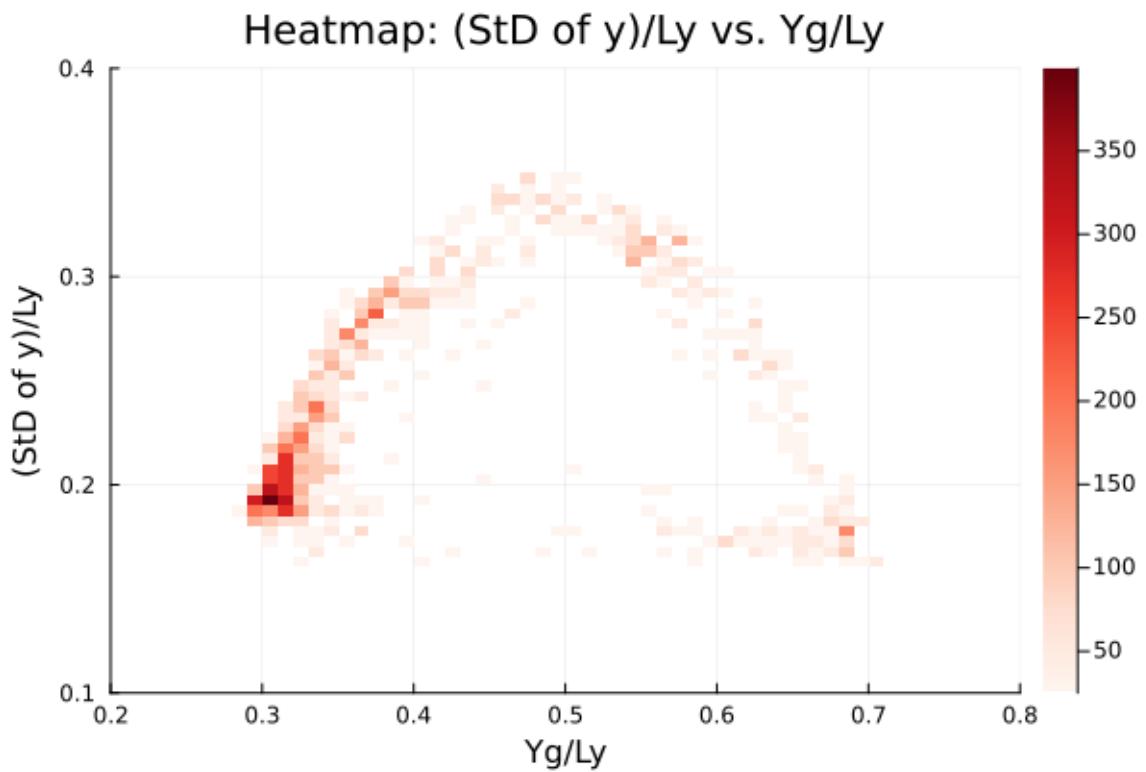


図 A.78: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.500$

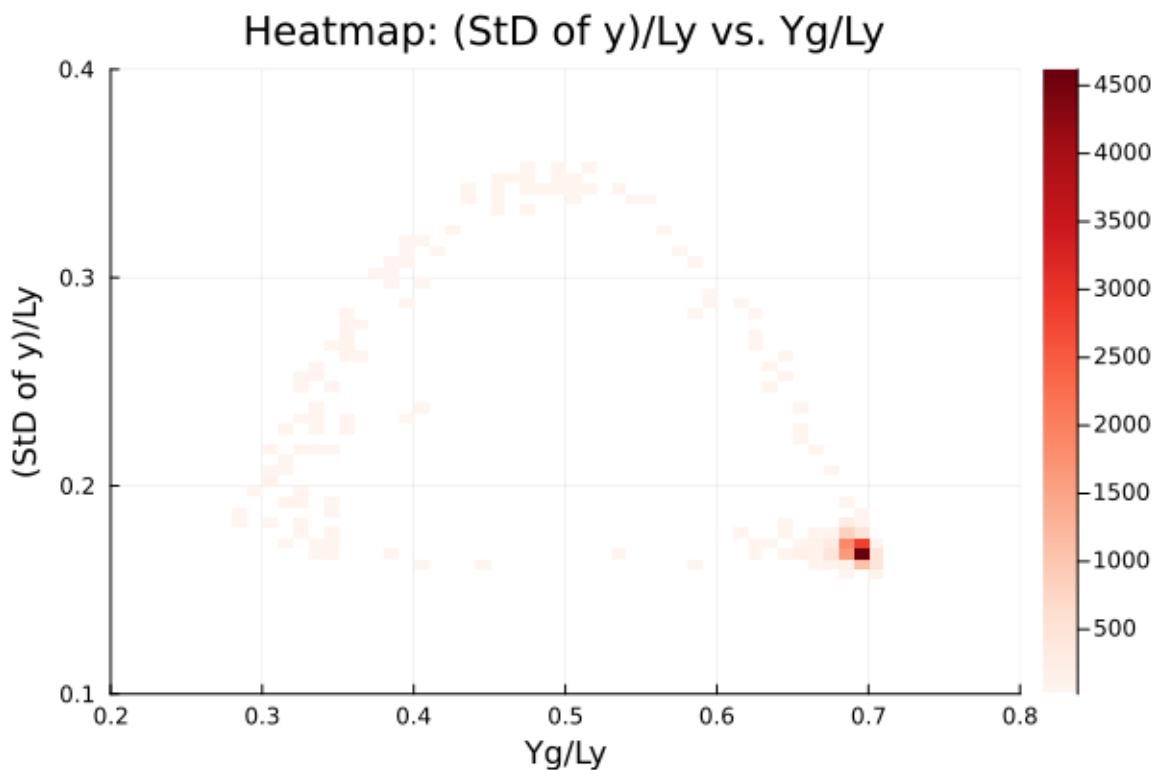


図 A.79: 重力を先にかけて, 热流を後からかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.500$

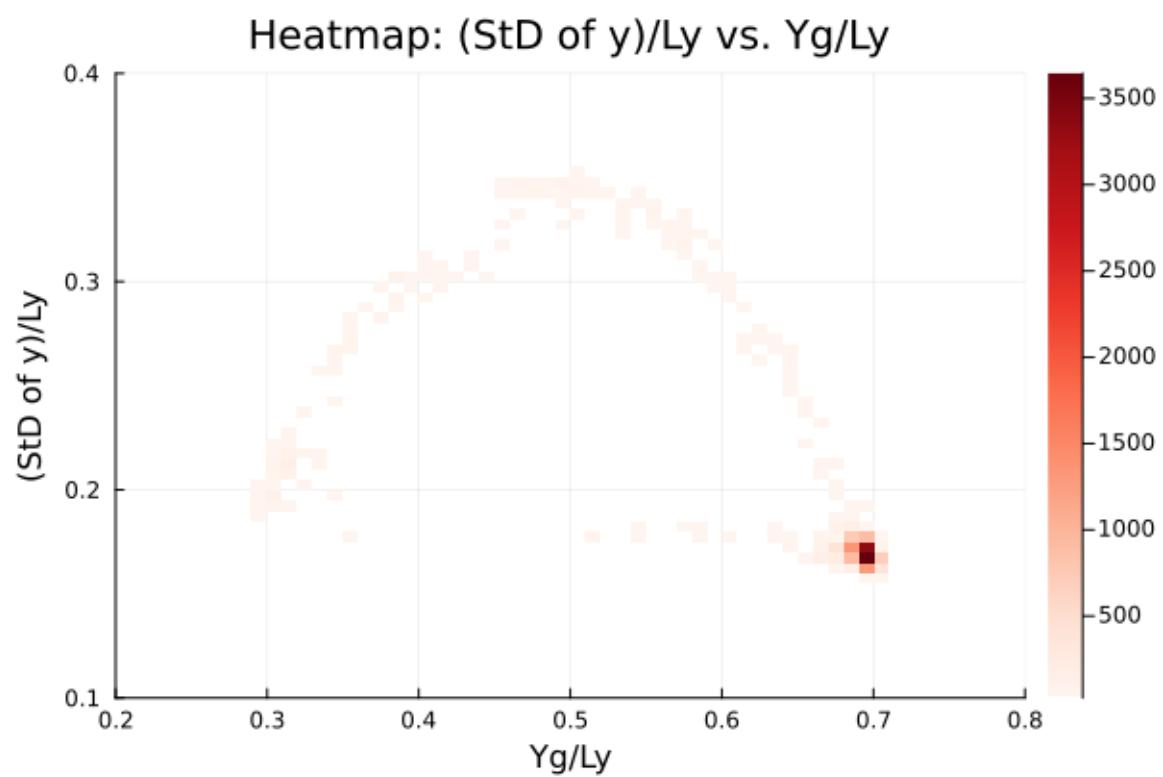


図 A.80: 重力を先にかけて、熱流を後からかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.500$

A.5.3 重力のみをかける

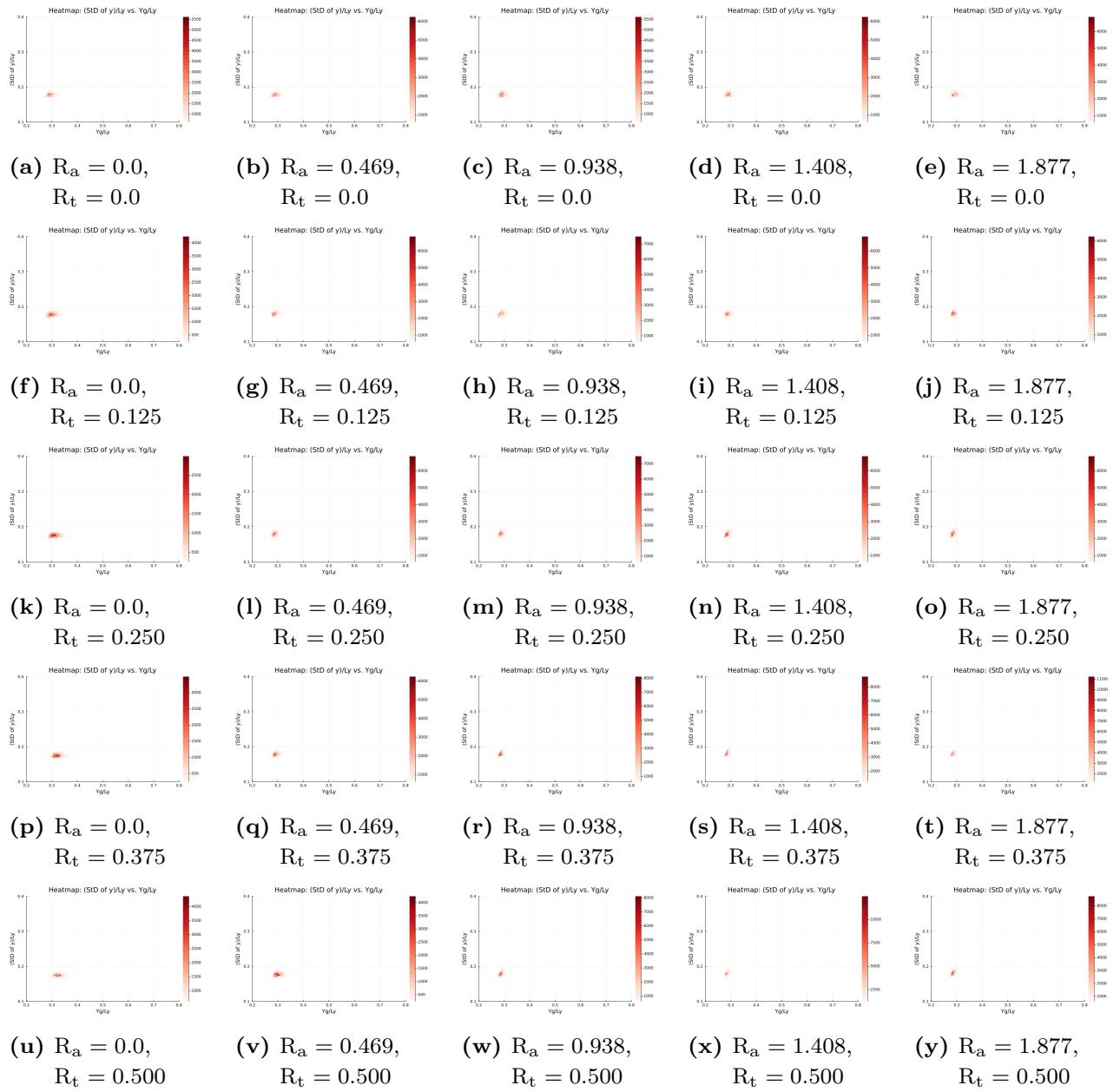


図 A.81: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

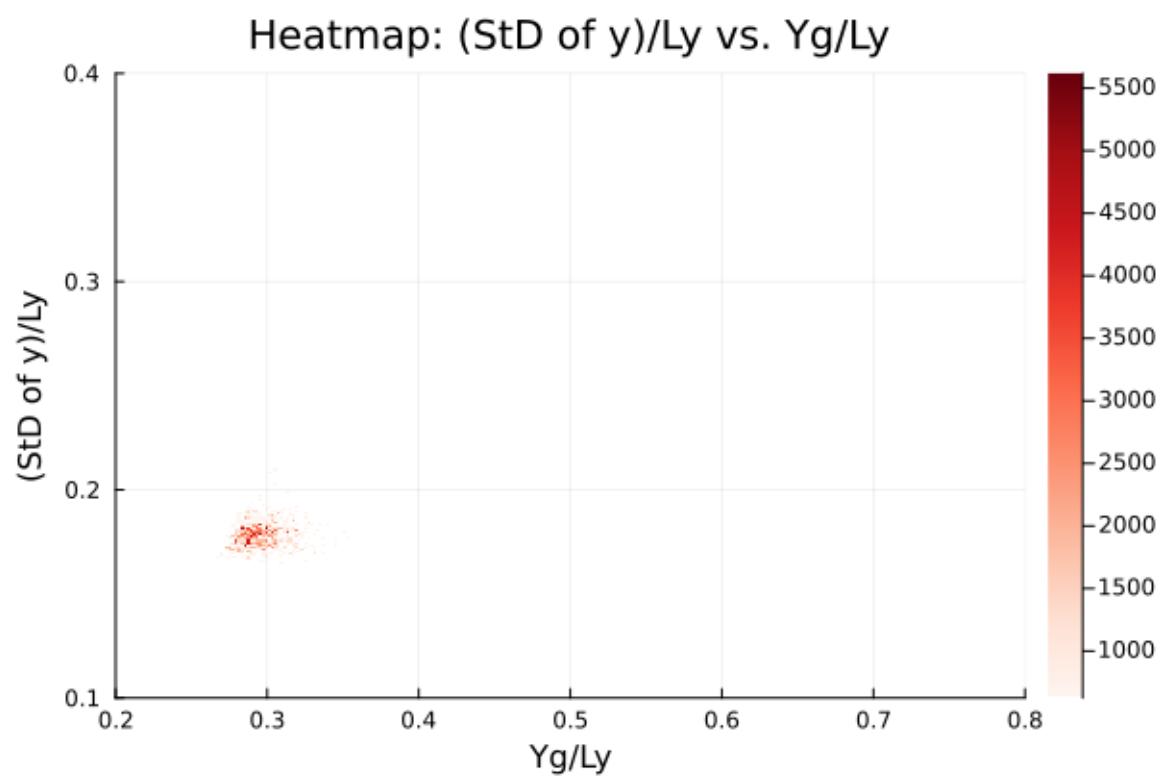


図 A.82: 重力のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

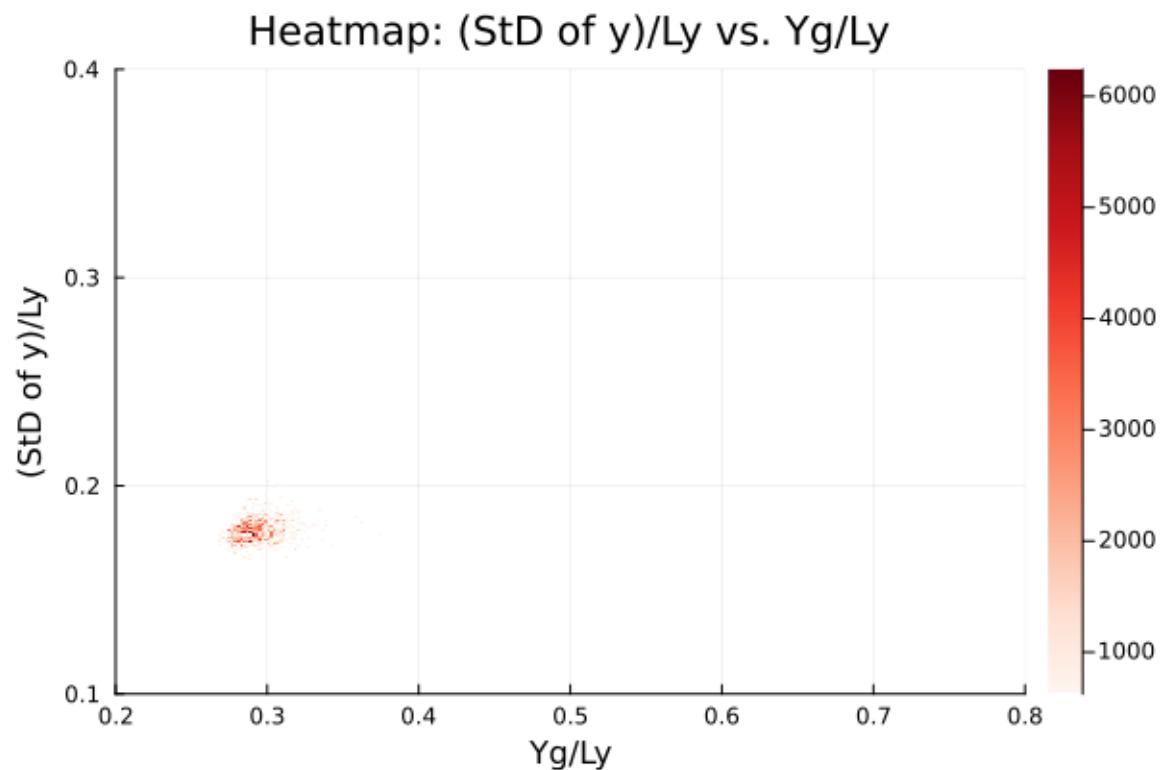


図 A.83: 重力のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.0$

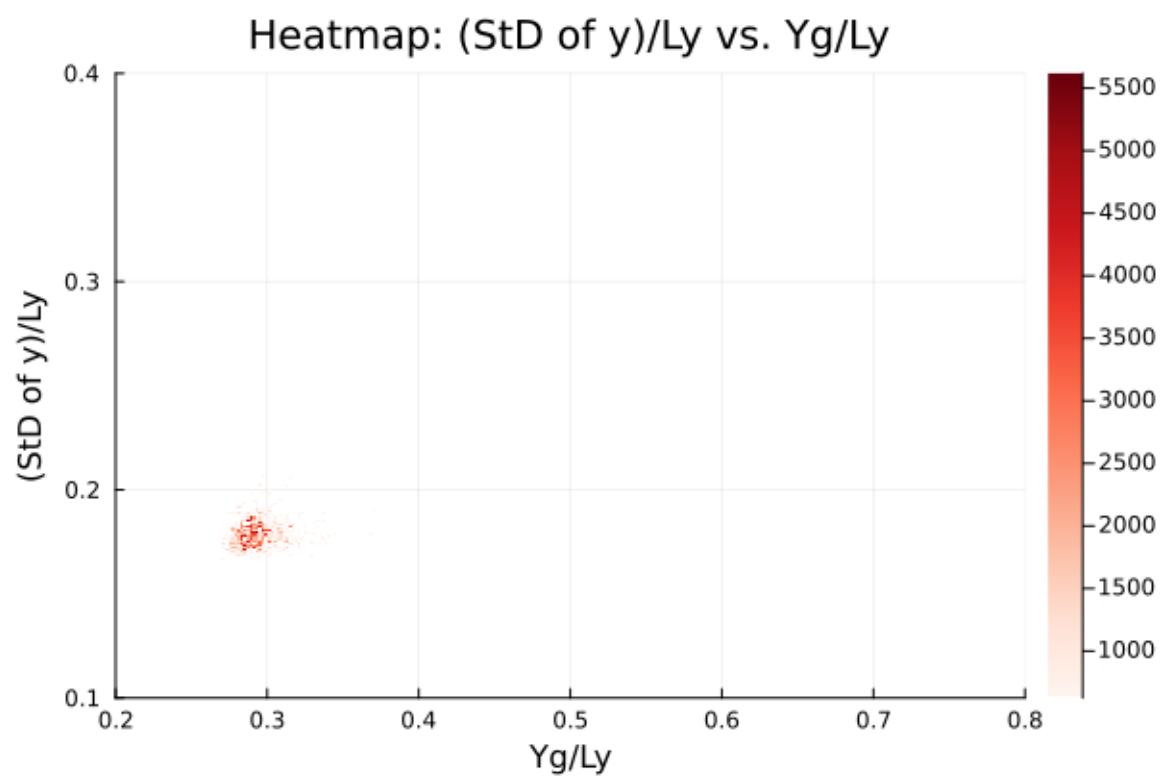


図 A.84: 重力のみをかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.0$

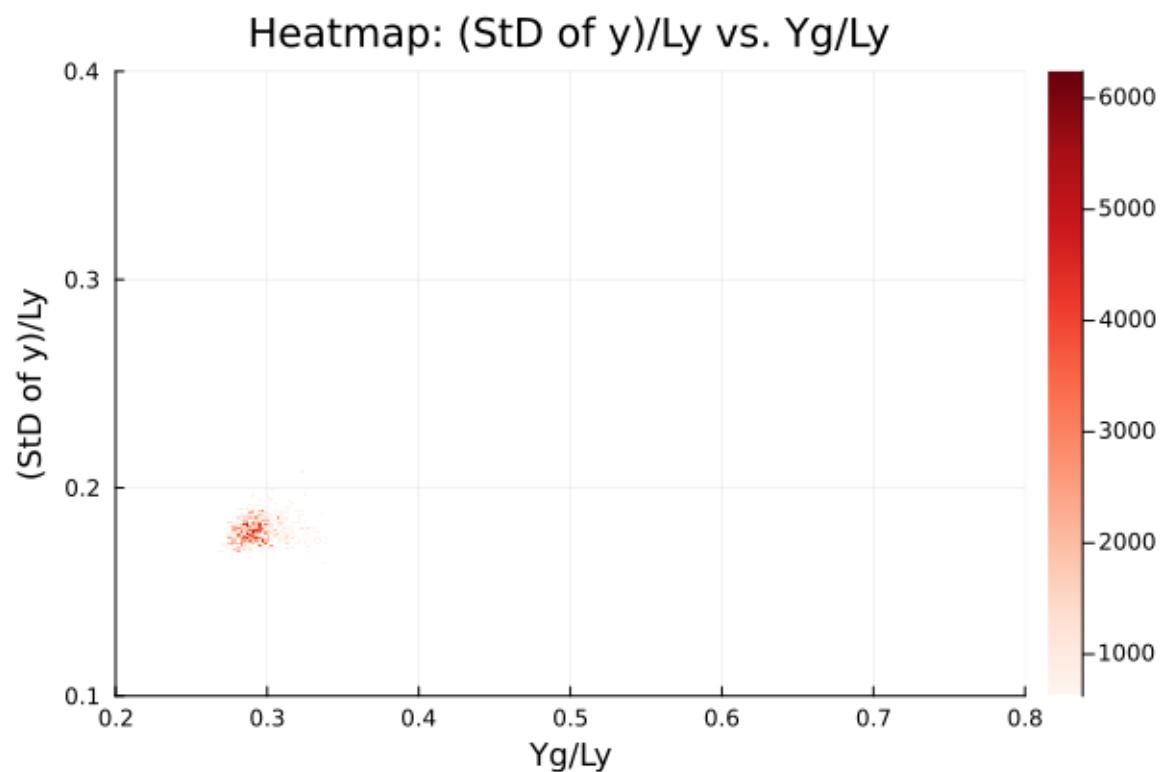


図 A.85: 重力のみをかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.0$

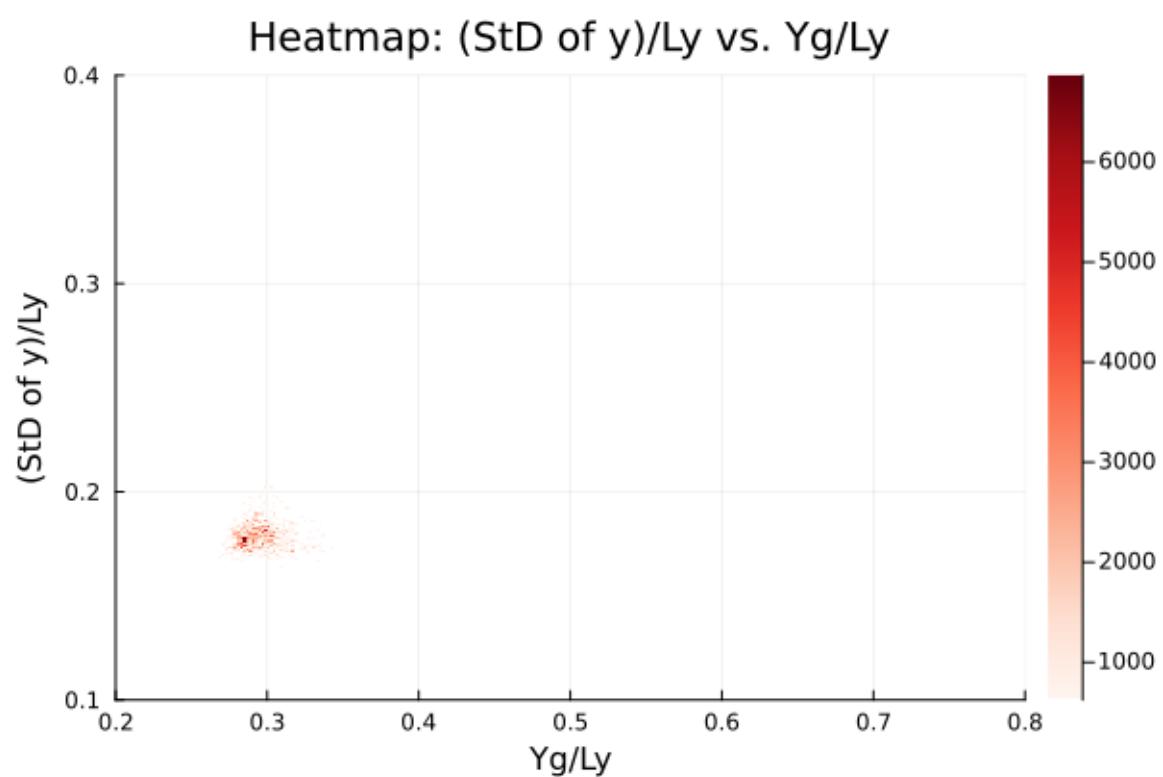


図 A.86: 重力のみをかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.0$

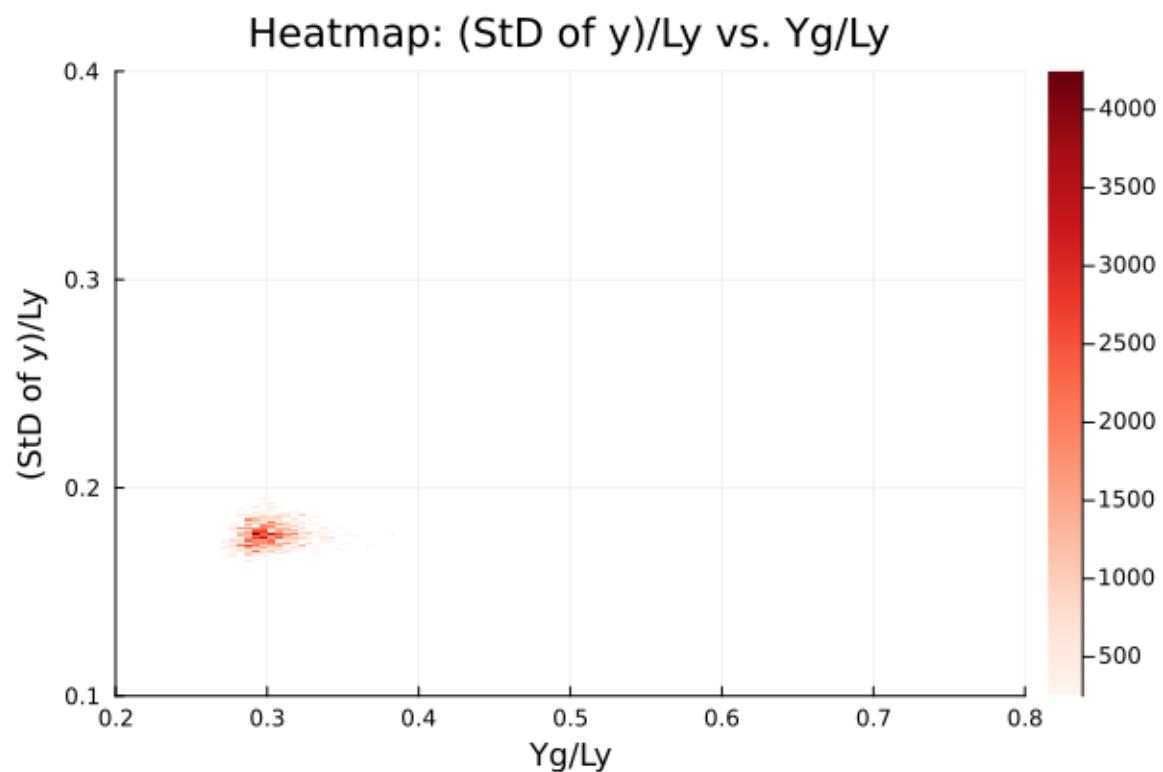


図 A.87: 重力のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.125$

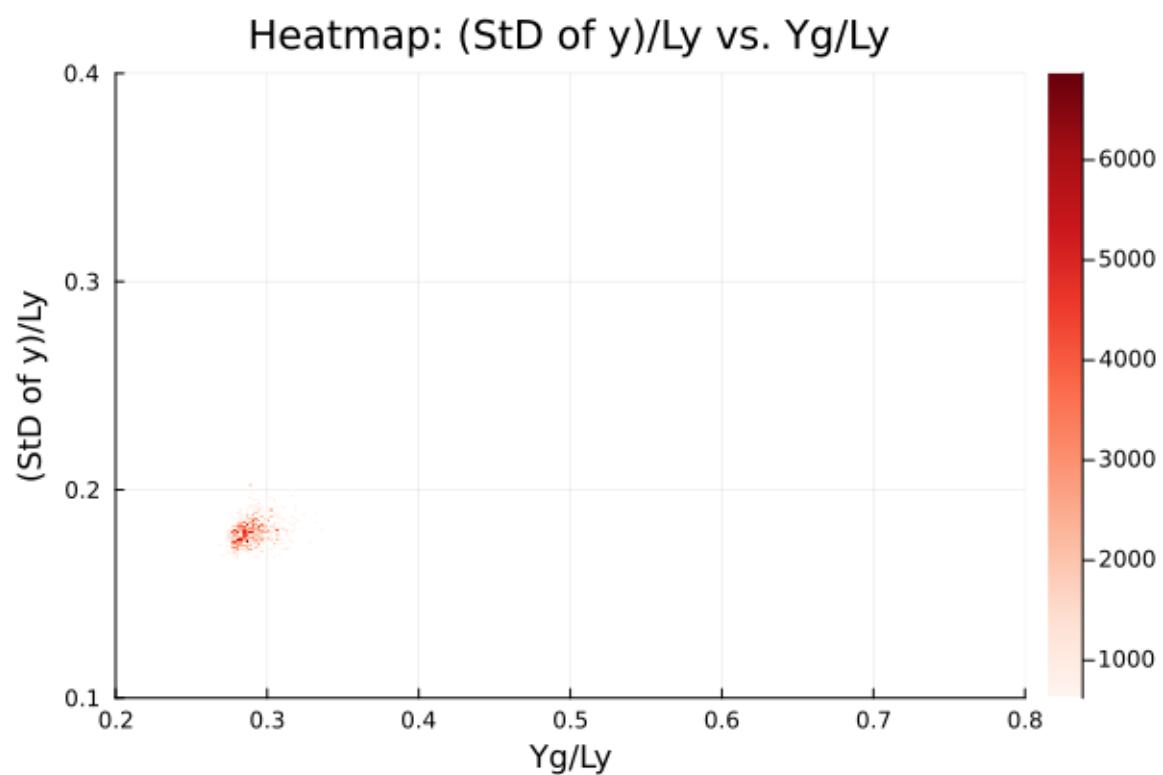


図 A.88: 重力のみをかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.125$

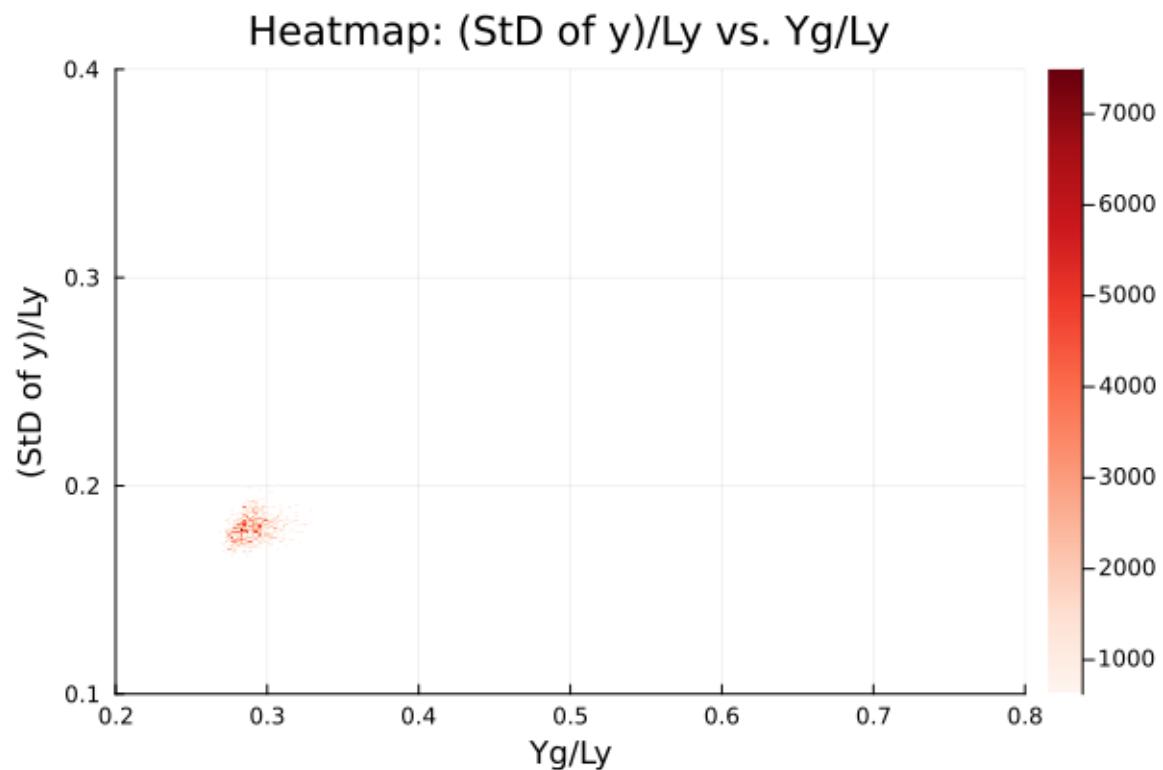


図 A.89: 重力のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.125$

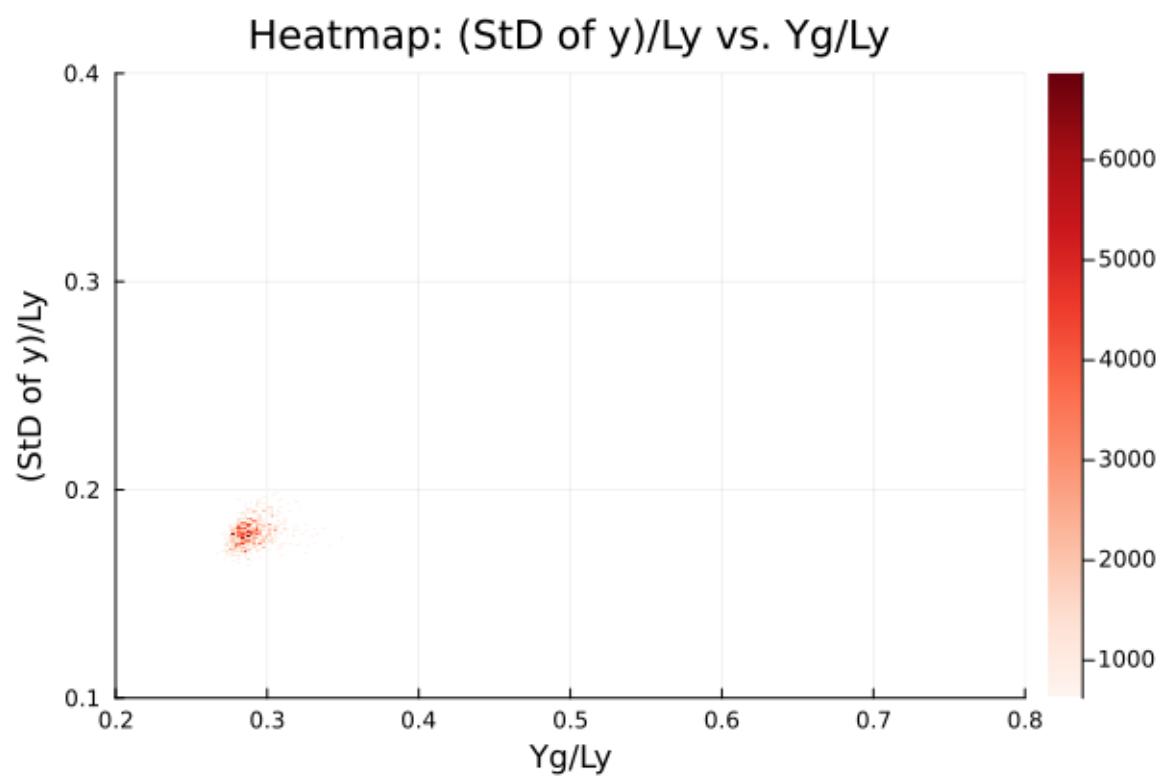


図 A.90: 重力のみをかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.125$

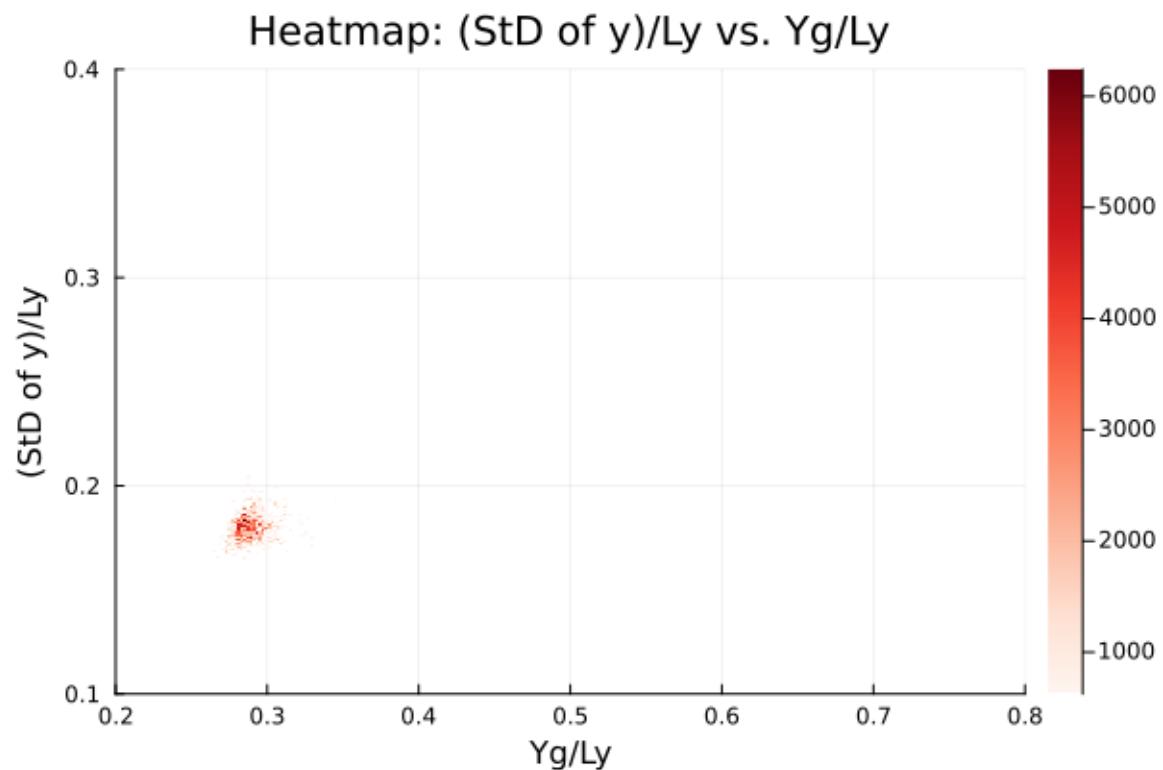


図 A.91: 重力のみをかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.125$

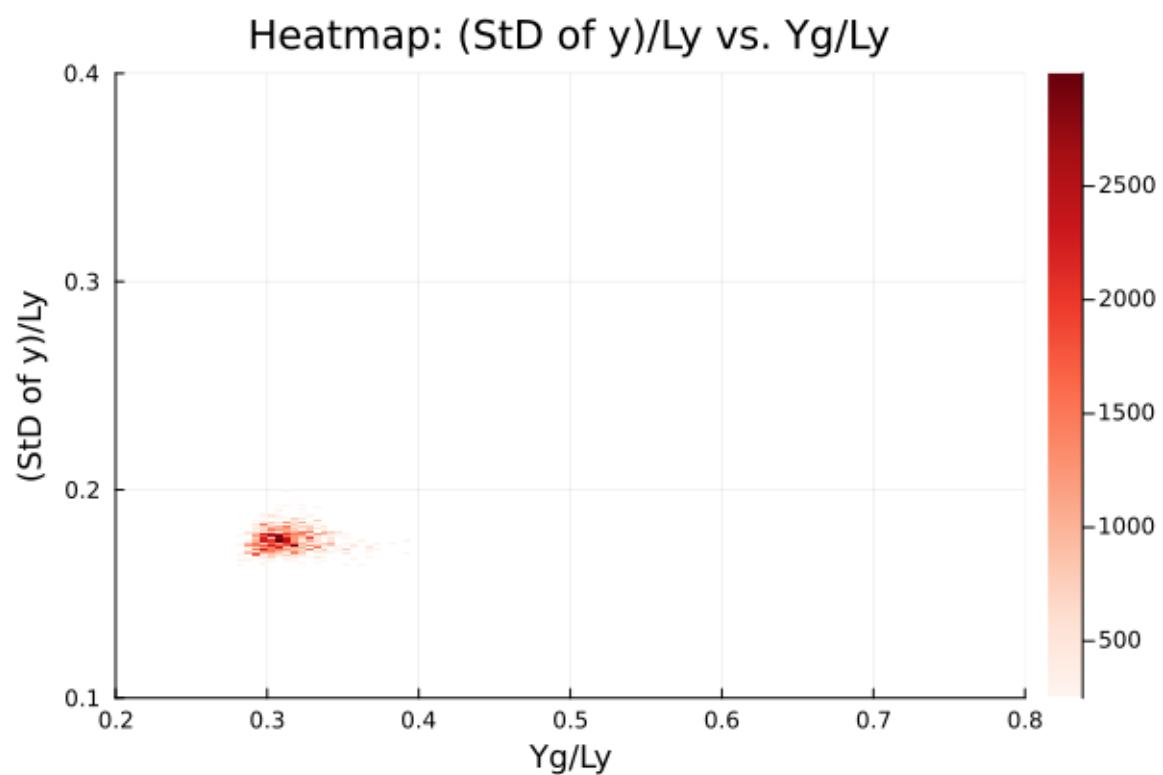


図 A.92: 重力のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.250$

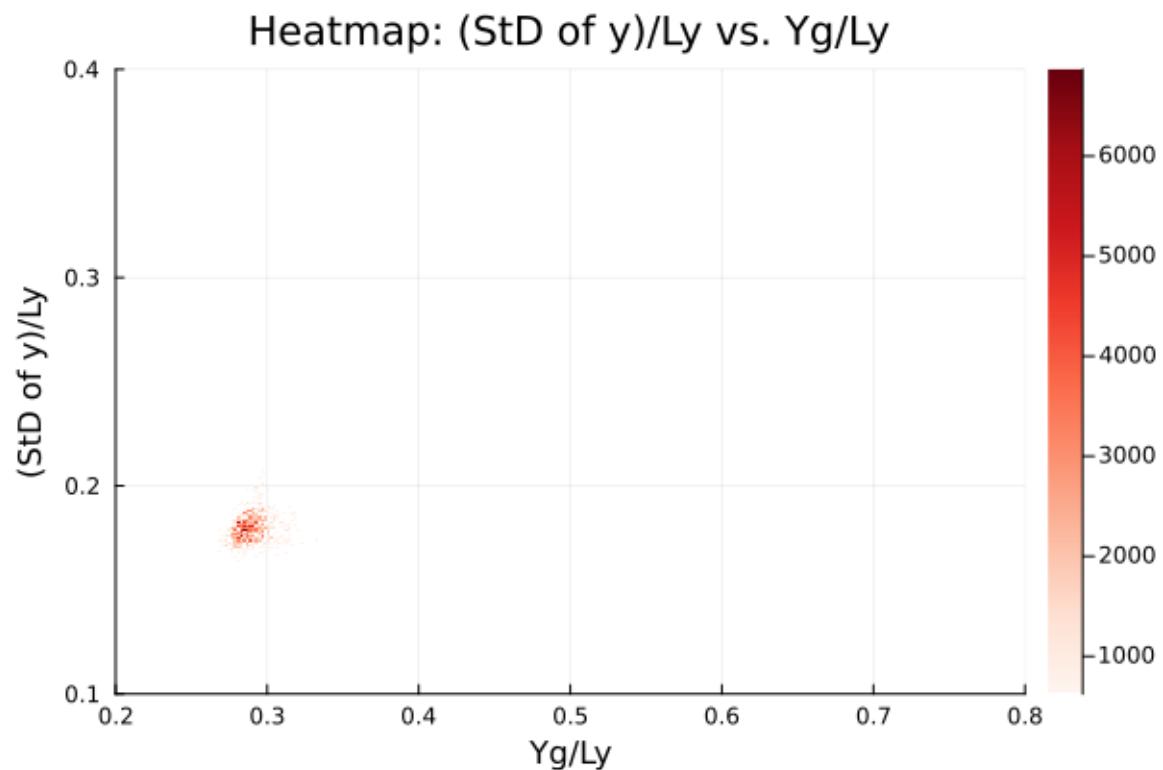


図 A.93: 重力のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.250$

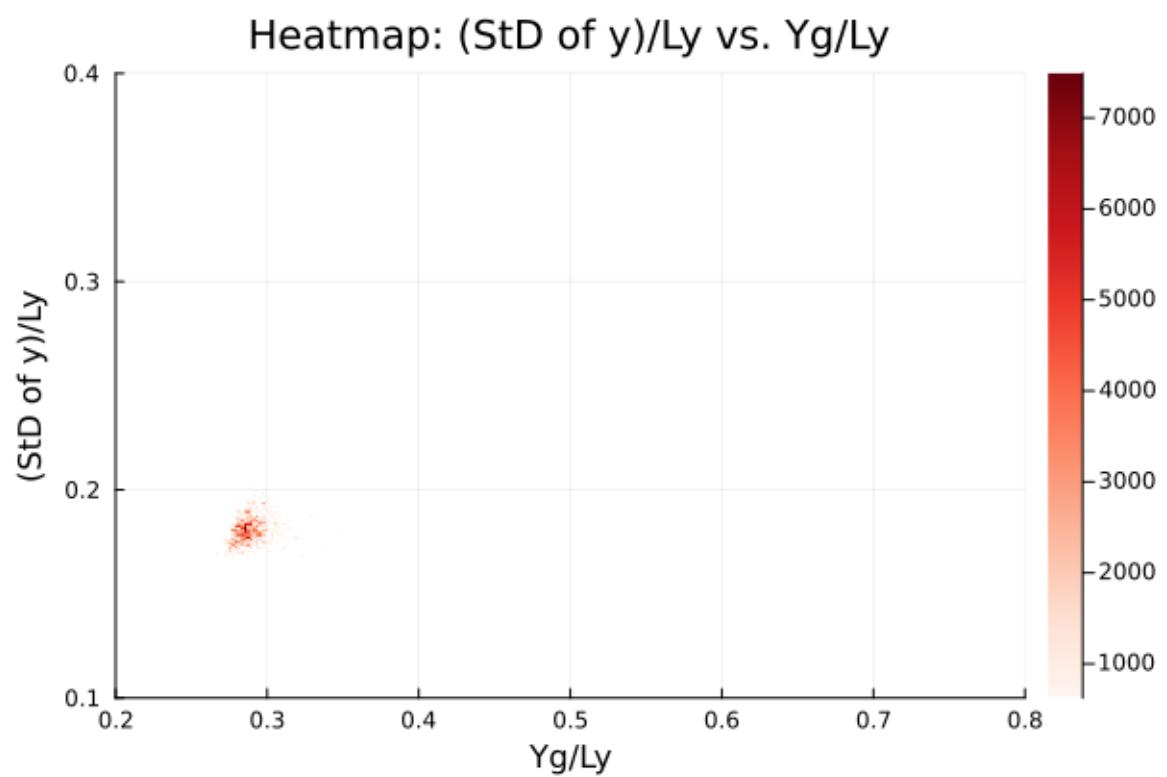


図 A.94: 重力のみをかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.250$

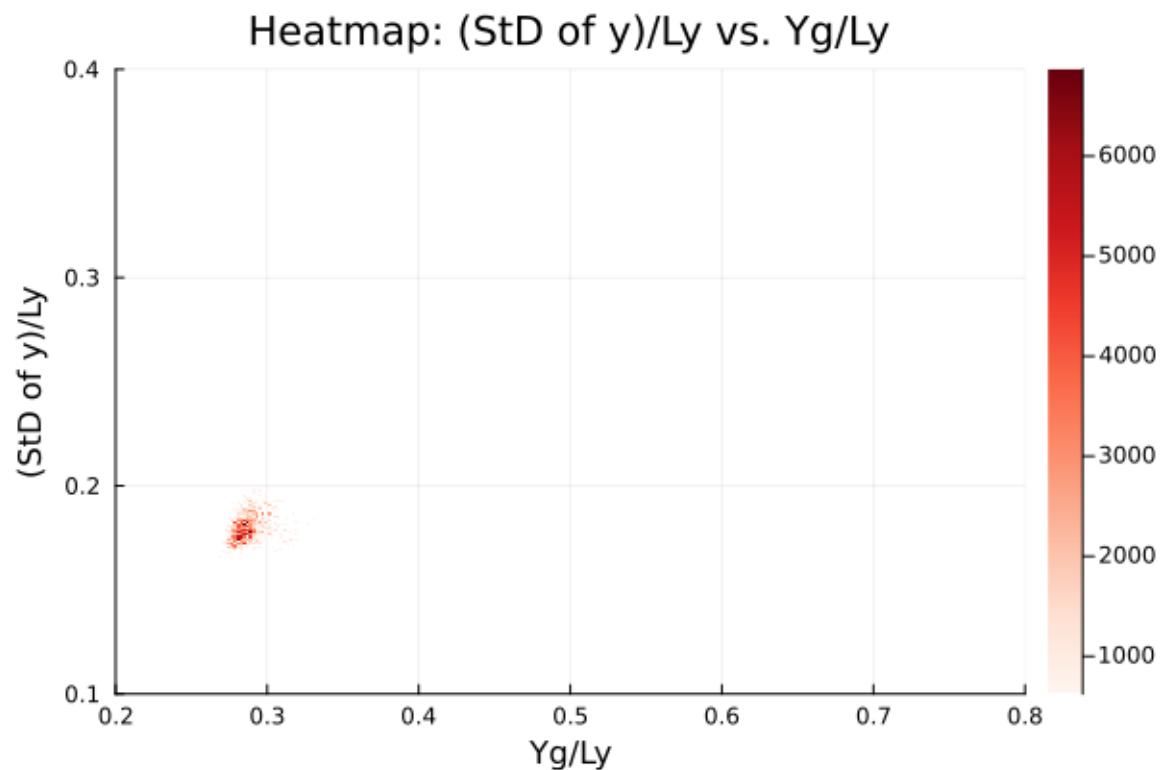


図 A.95: 重力のみをかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.250$

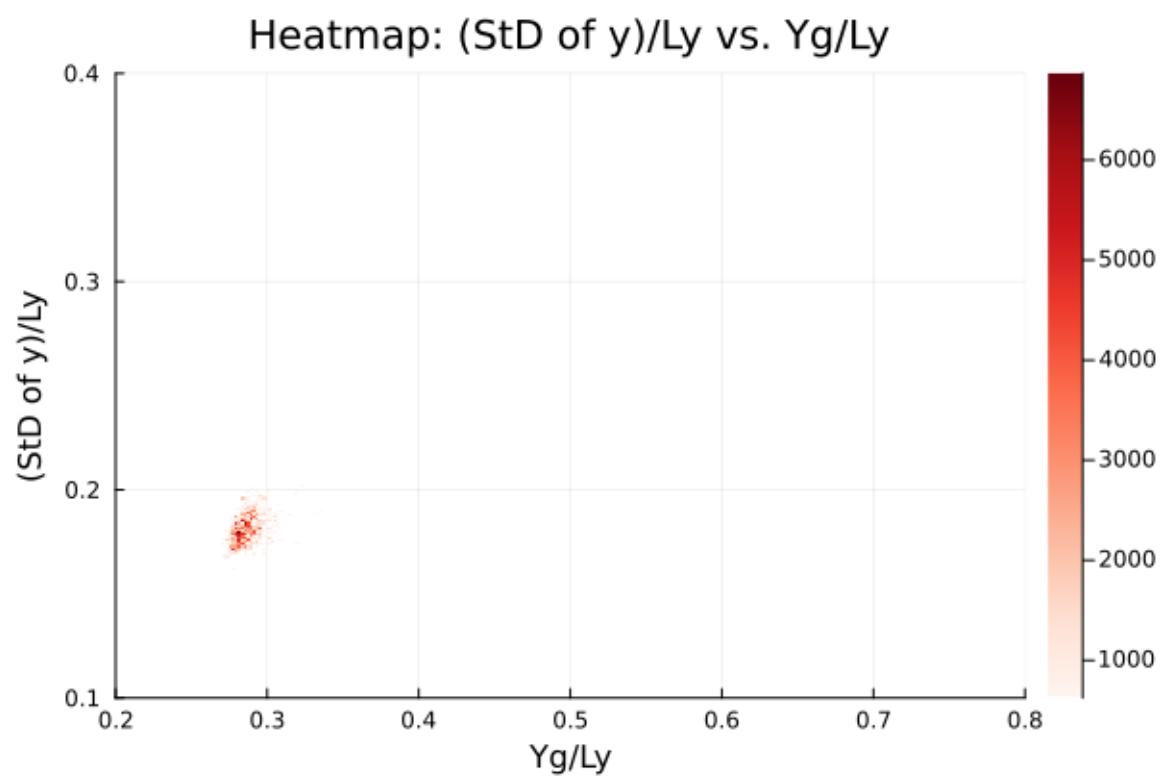


図 A.96: 重力のみをかける. $R_a = 1.877, R_t = 0.250$

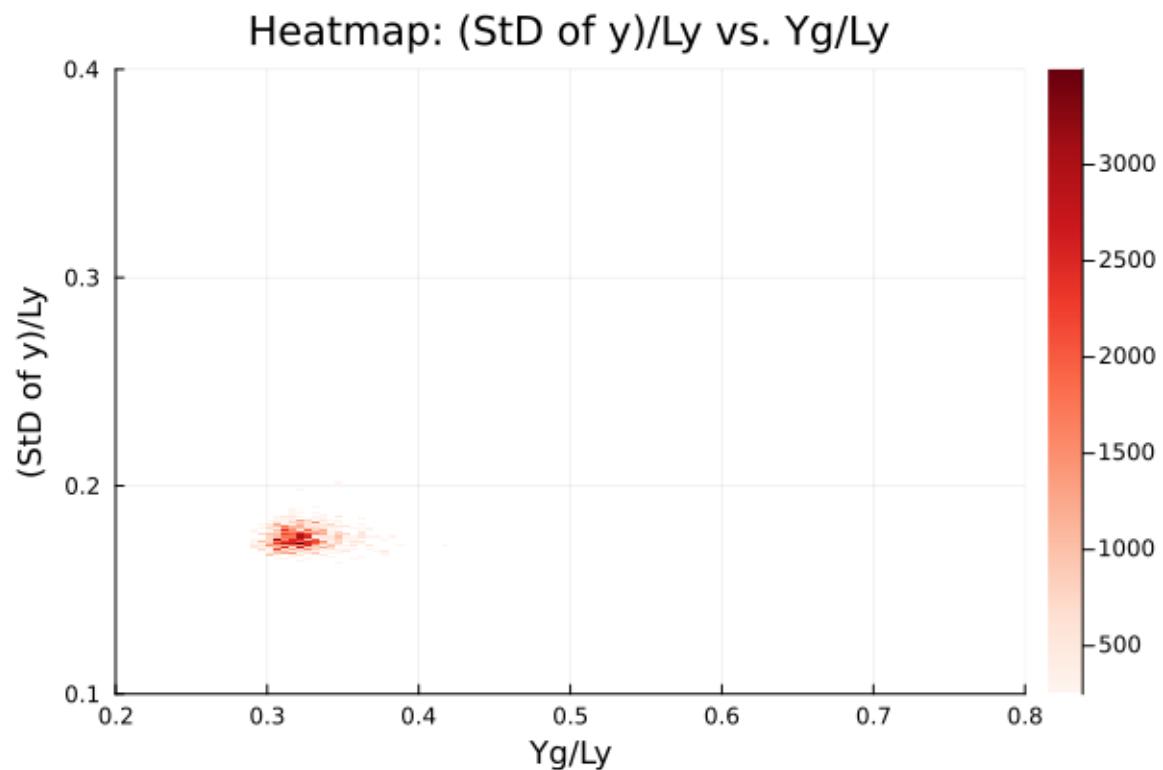


図 A.97: 重力のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.375$

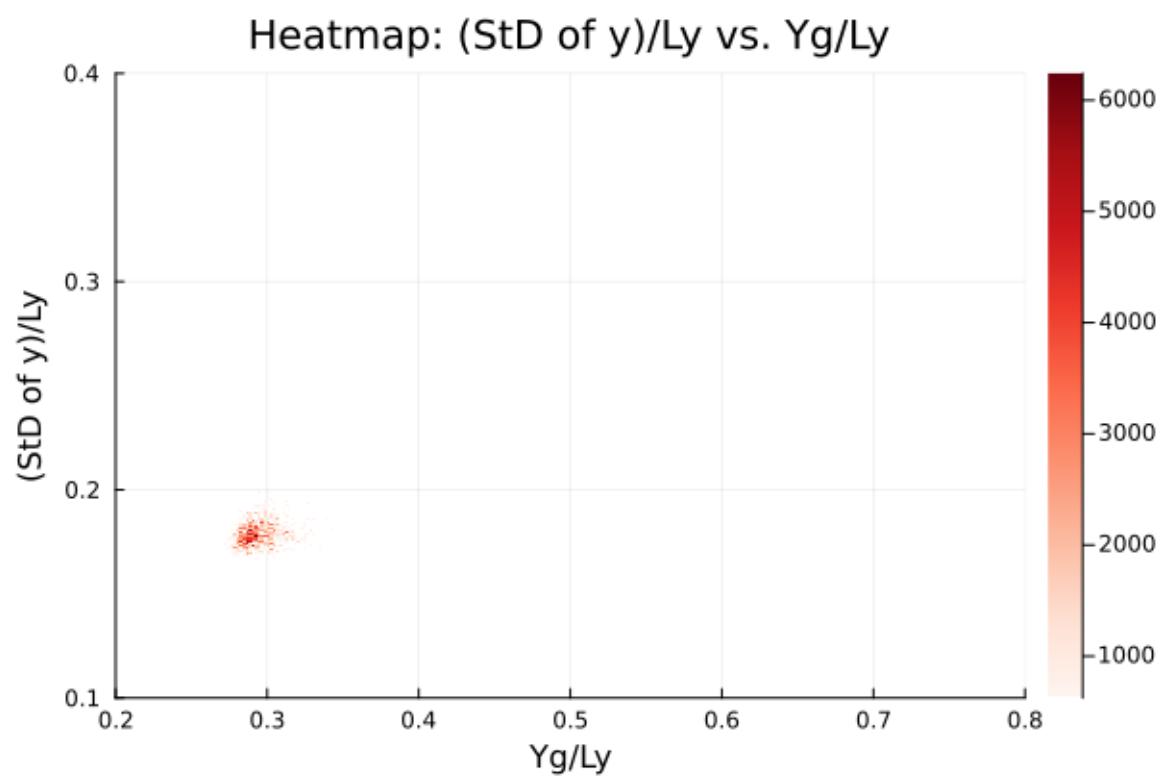


図 A.98: 重力のみをかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.375$

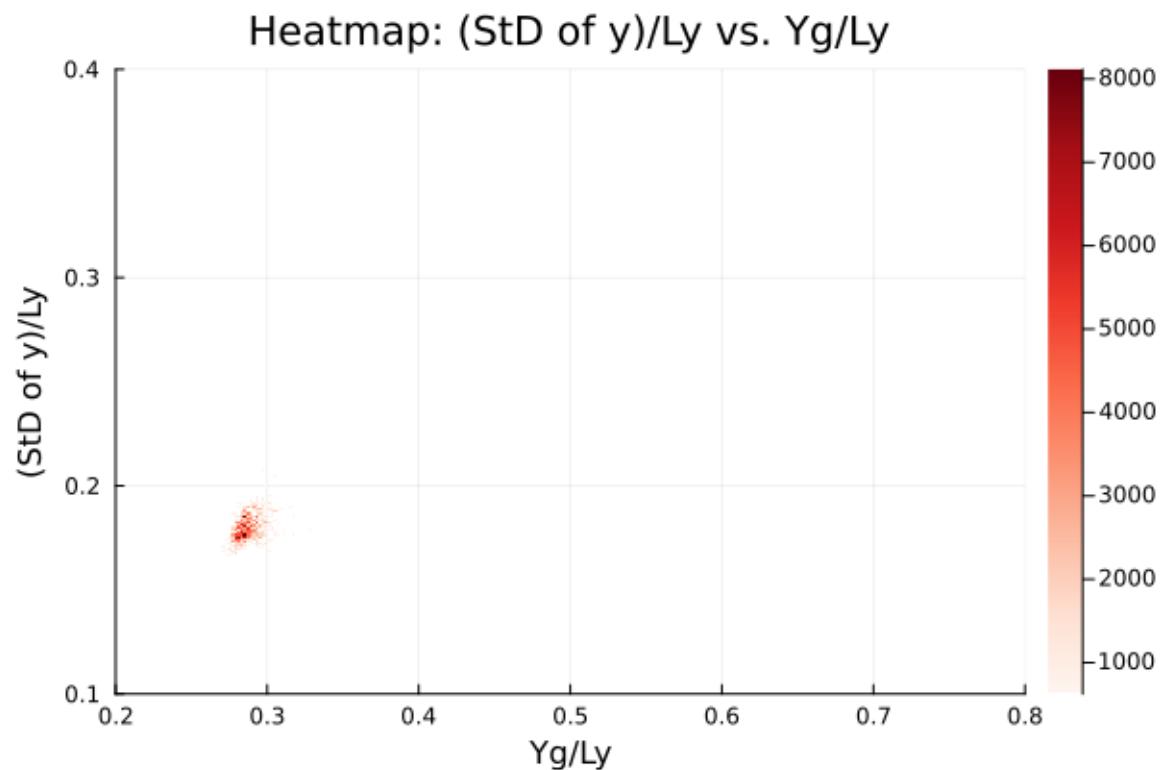


図 A.99: 重力のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.375$

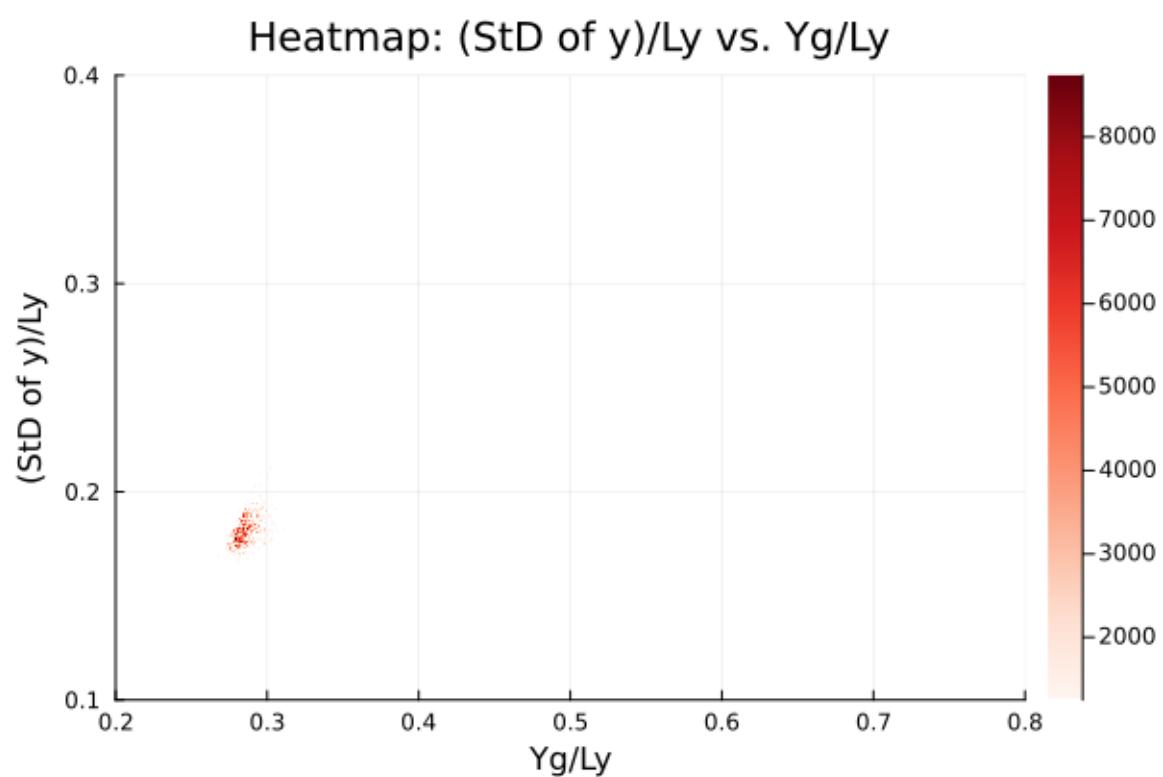


図 A.100: 重力のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.375$

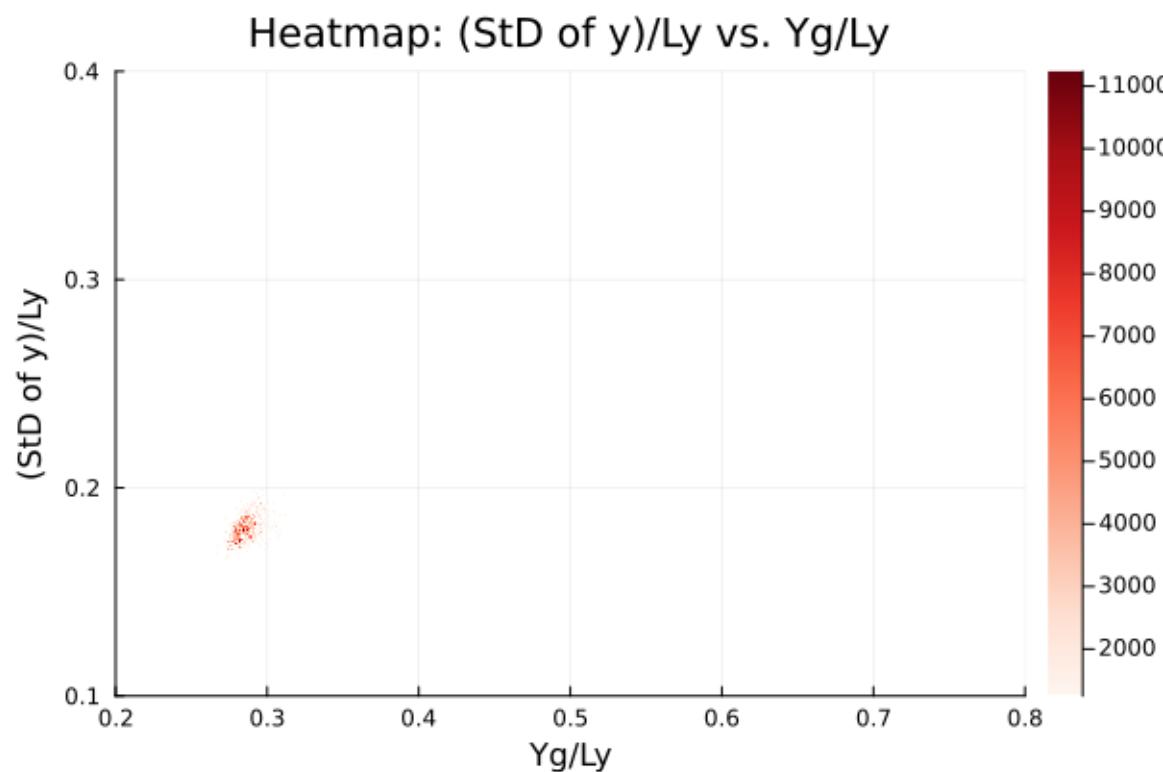


図 A.101: 重力のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.375$

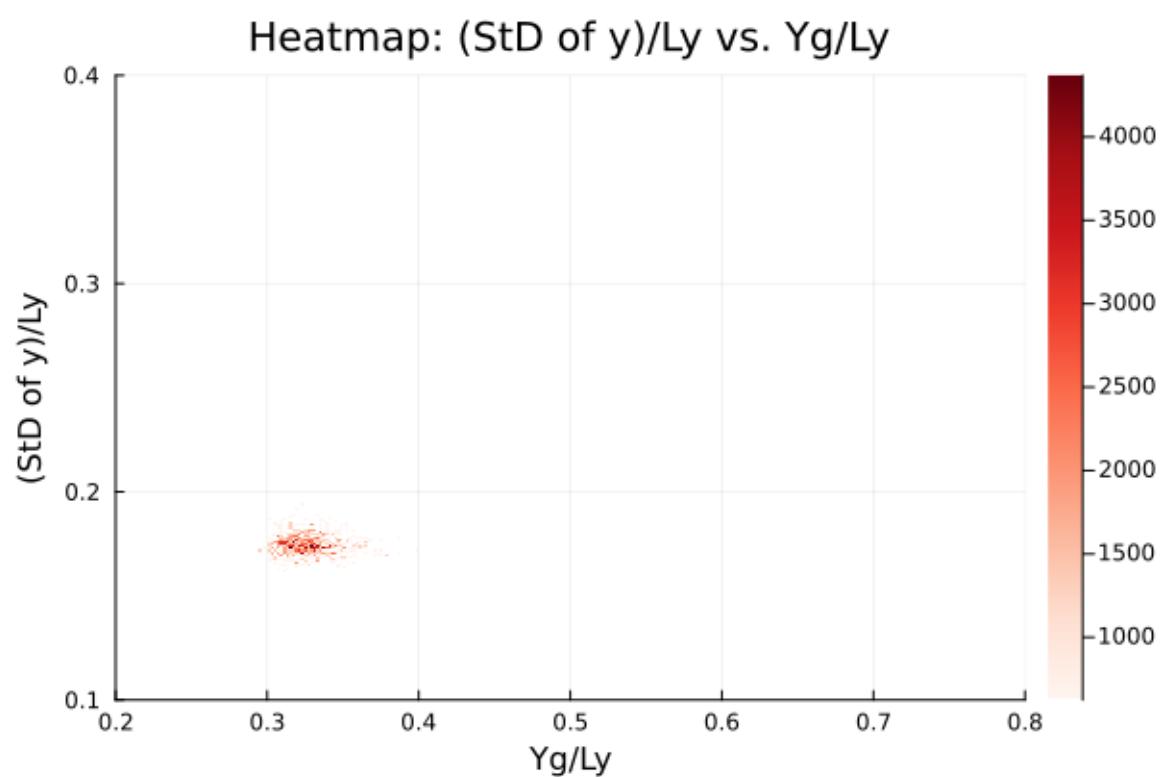


図 A.102: 重力のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.500$

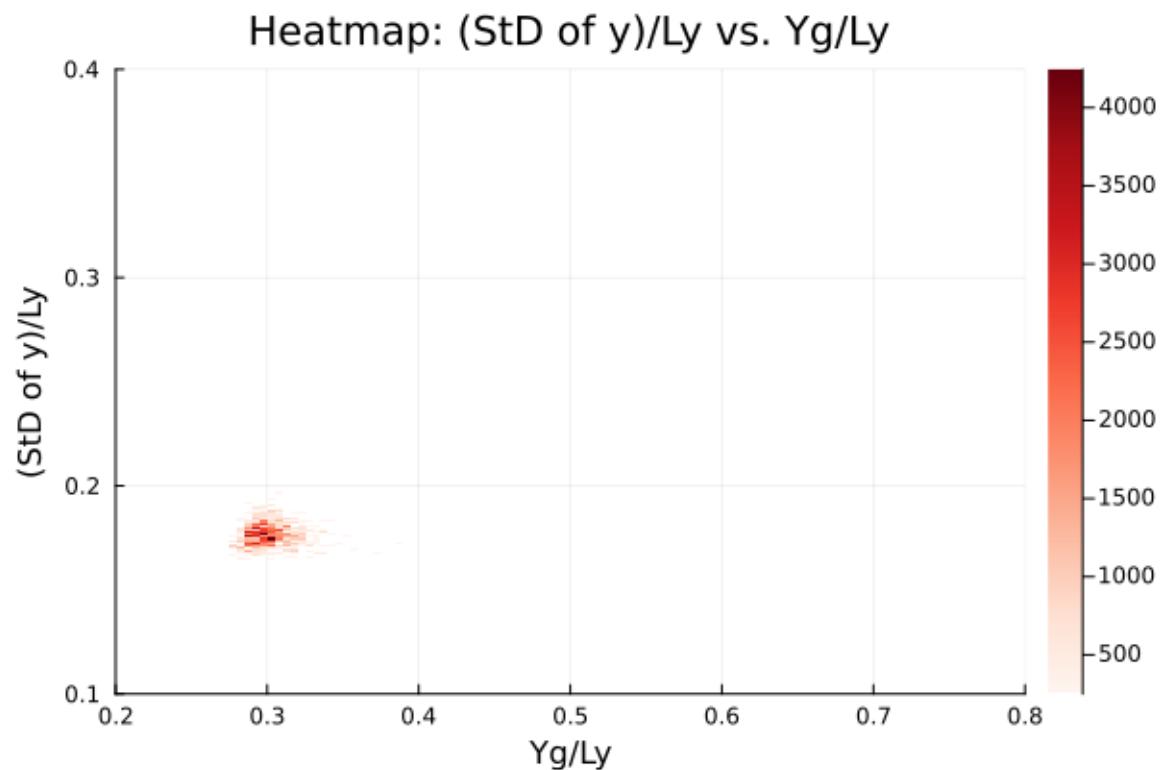


図 A.103: 重力のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.500$

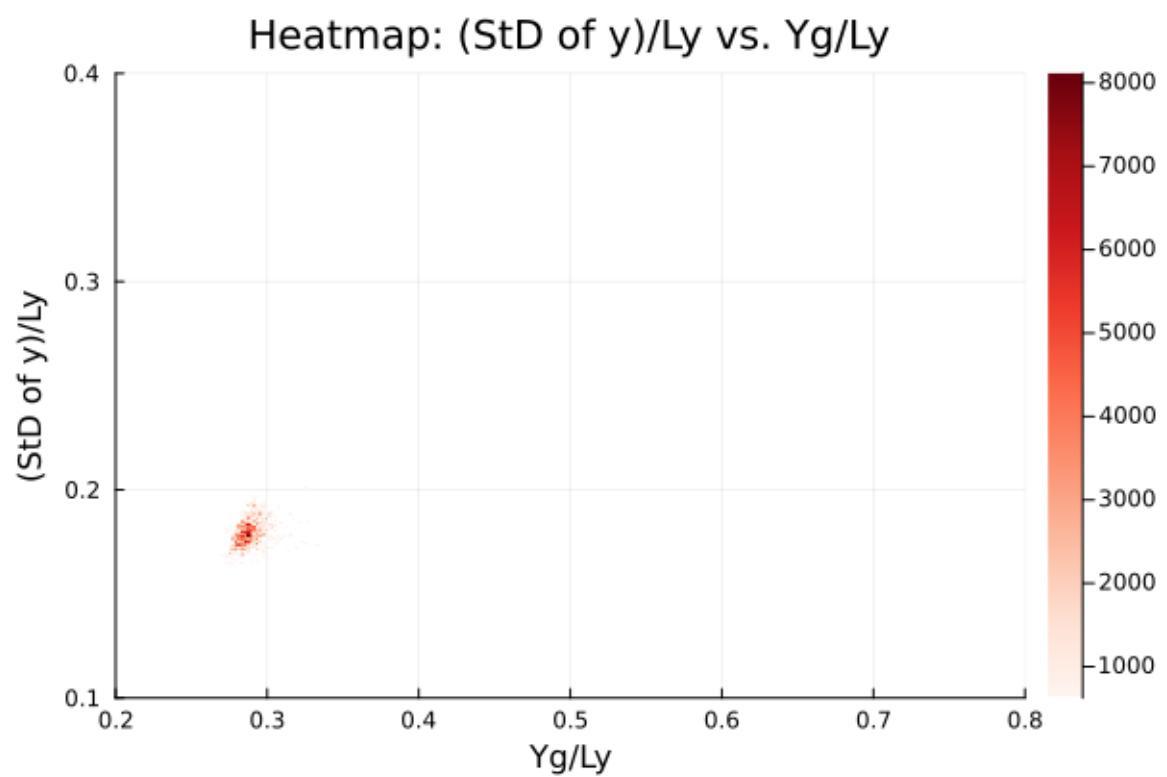


図 A.104: 重力のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.500$

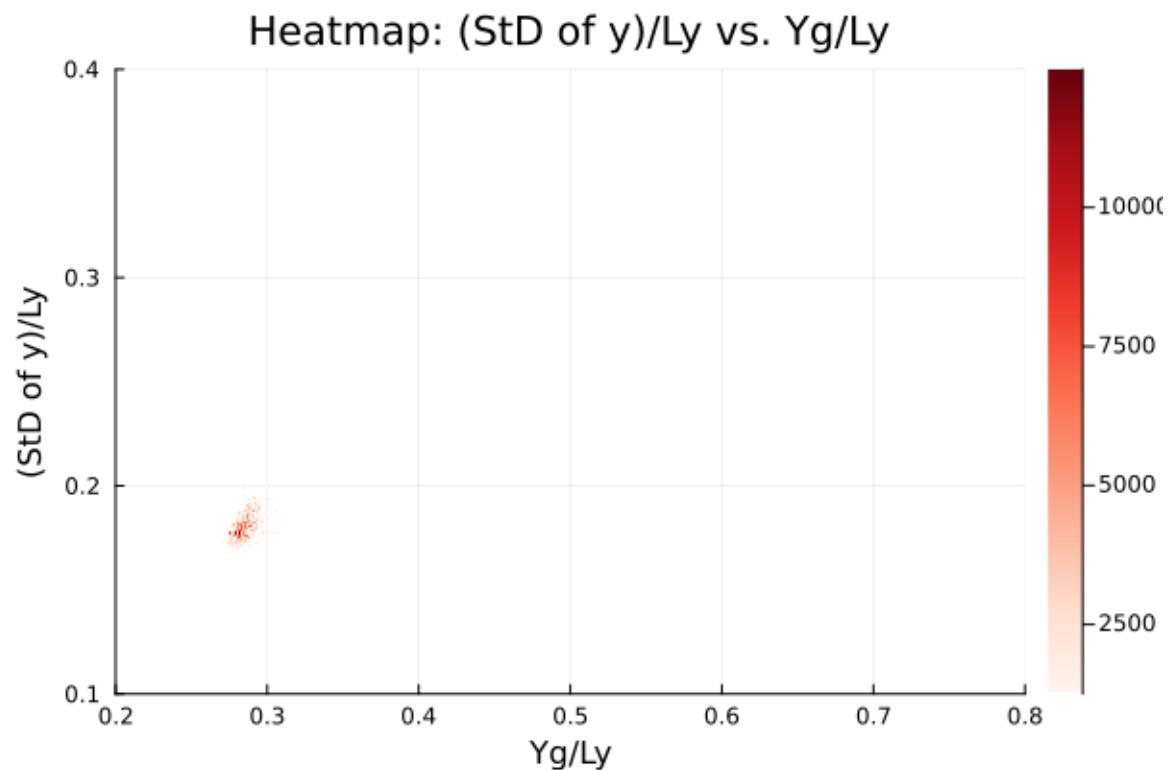


図 A.105: 重力のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.500$

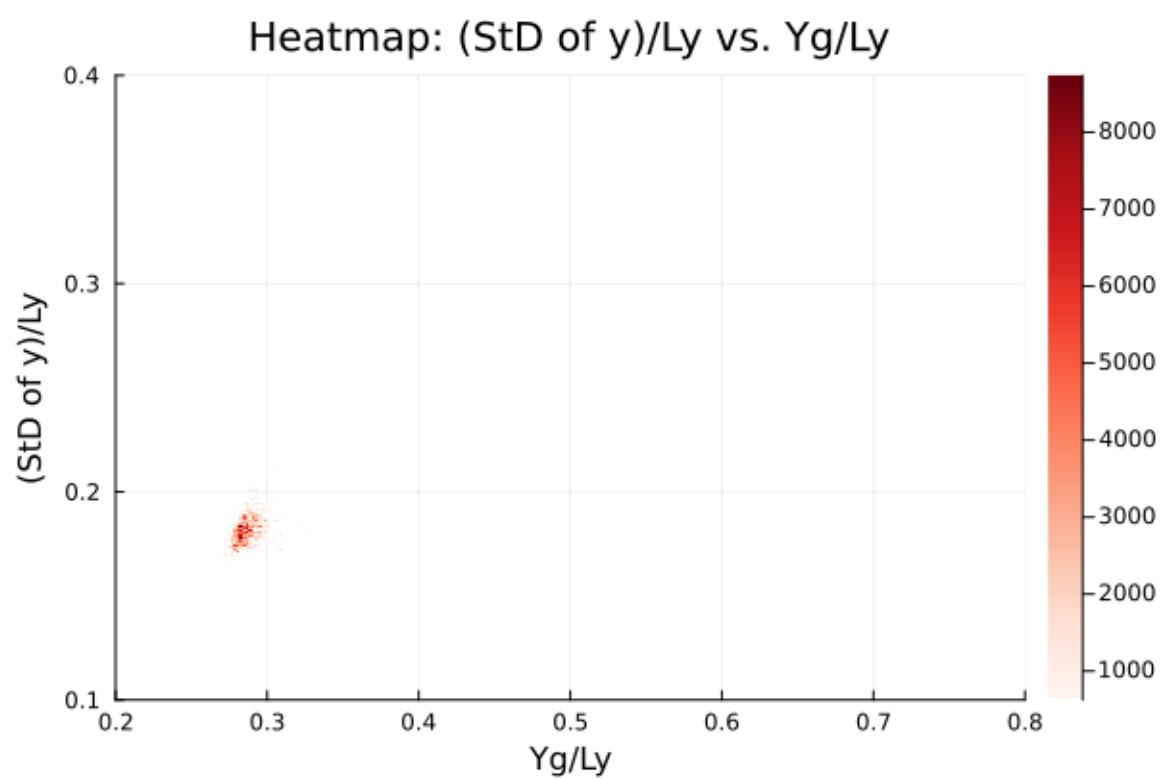


図 A.106: 重力のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.500$

A.5.4 热流のみをかける

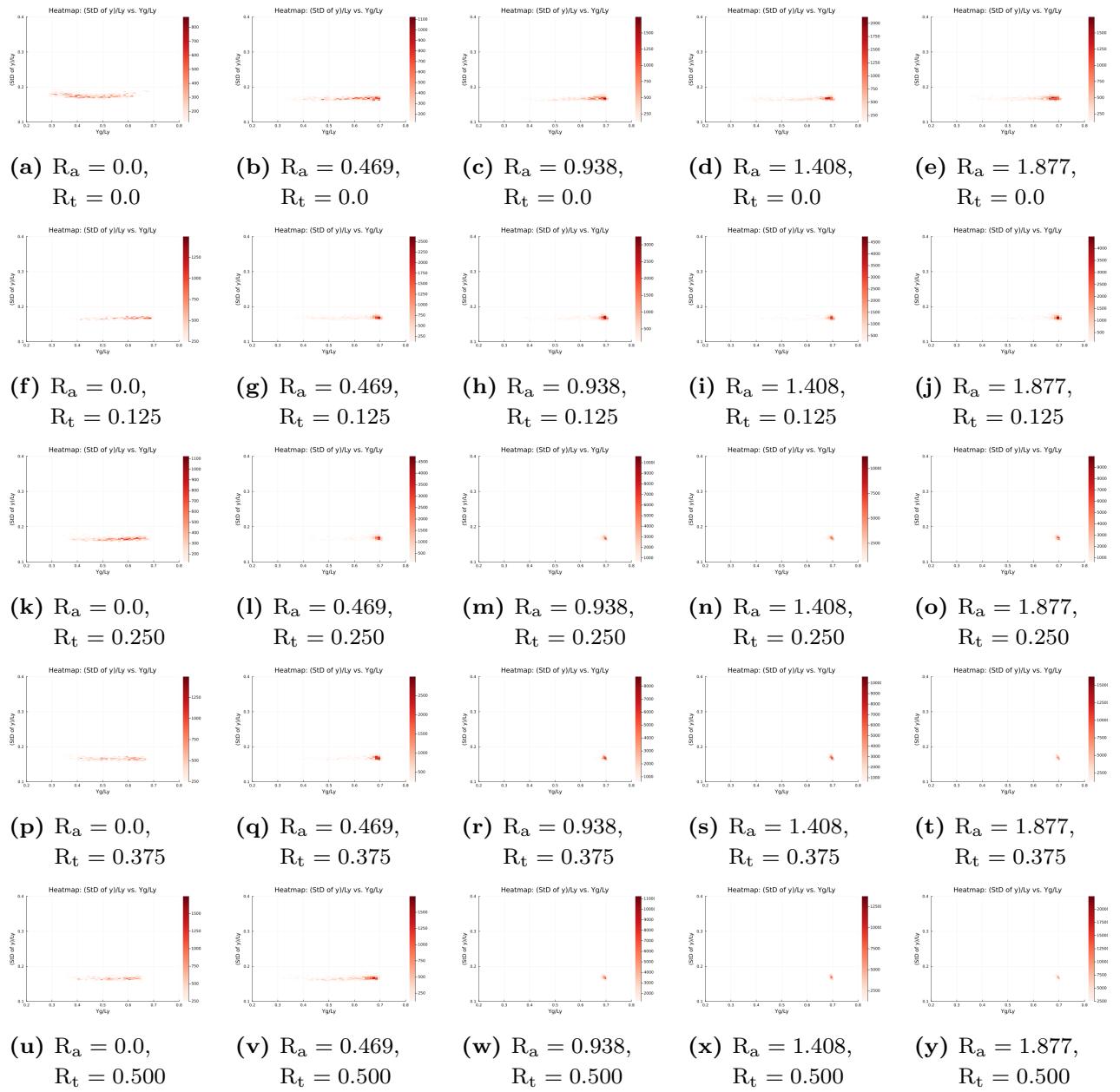


図 A.107: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

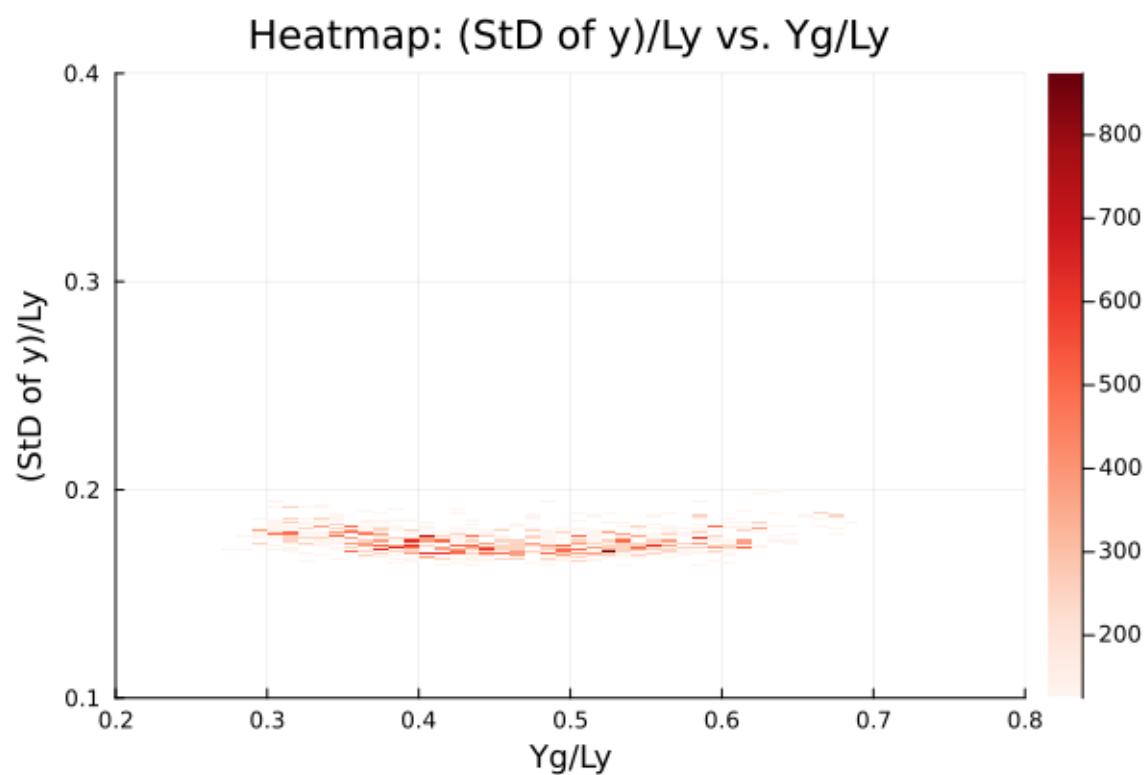


図 A.108: 热流のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.0$

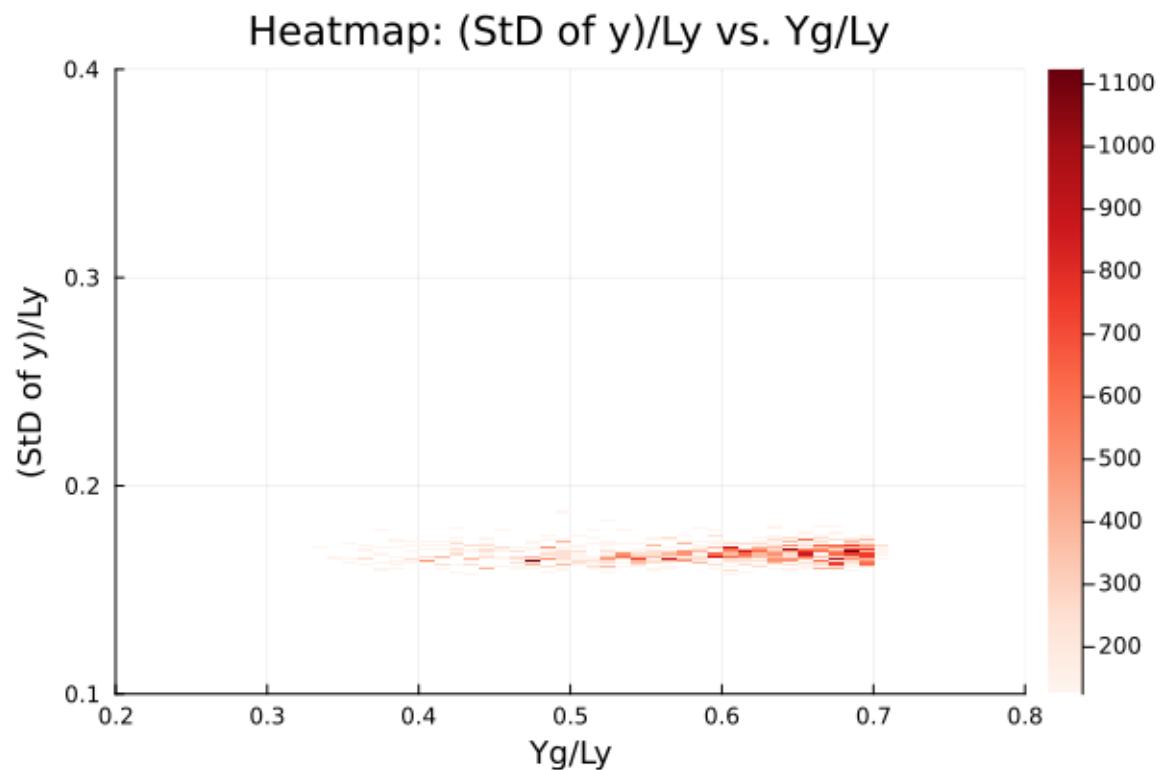


図 A.109: 热流のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.0$

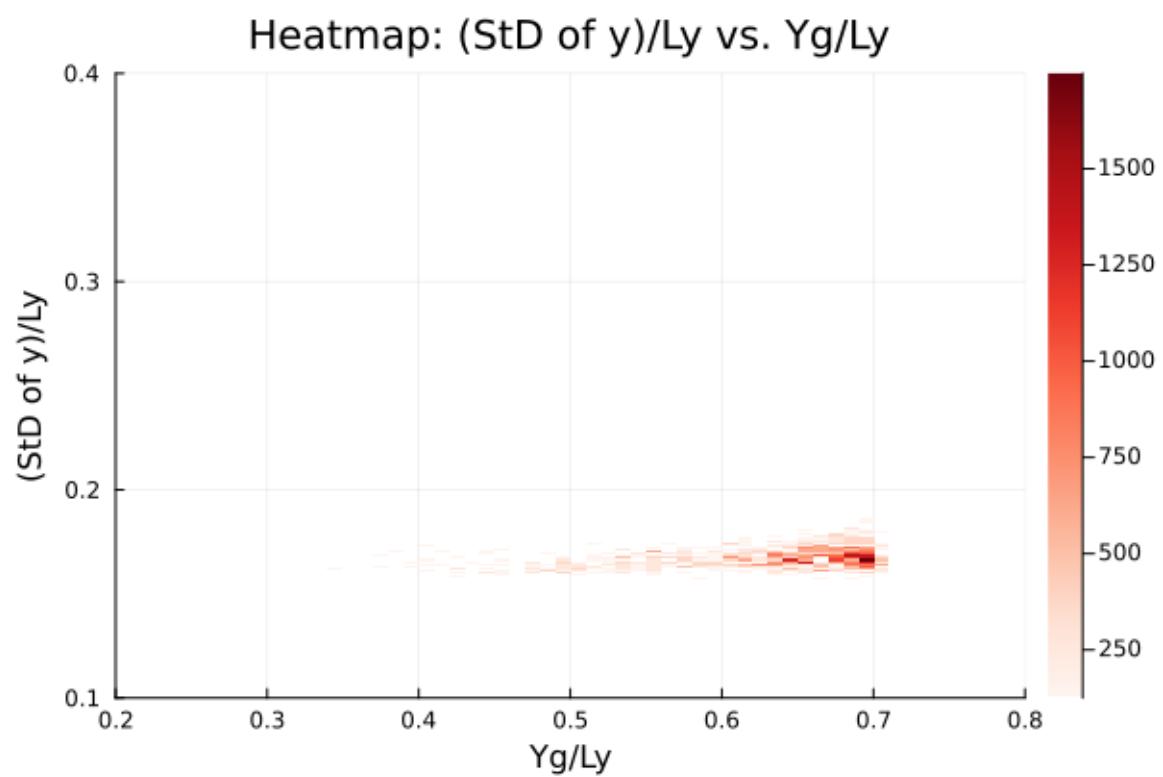


図 A.110: 热流のみをかける. $R_a = 0.938, R_t = 0.0$

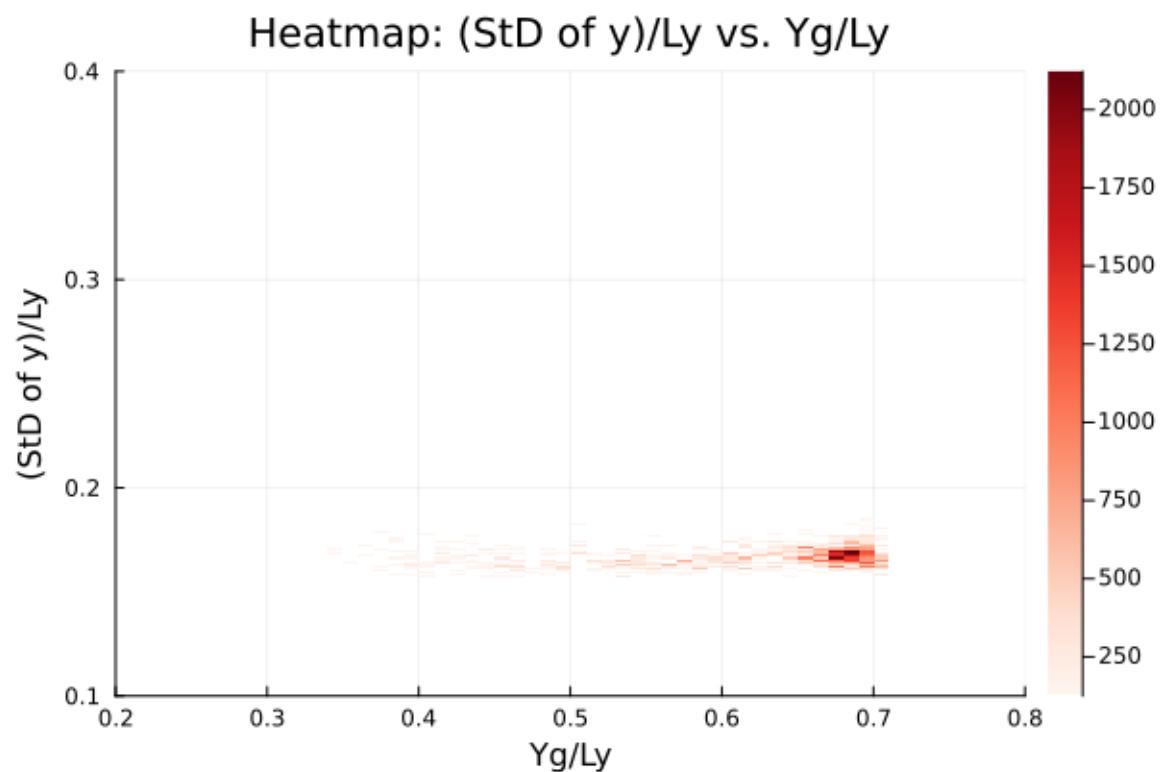


図 A.111: 热流のみをかける. $R_a = 1.408, R_t = 0.0$

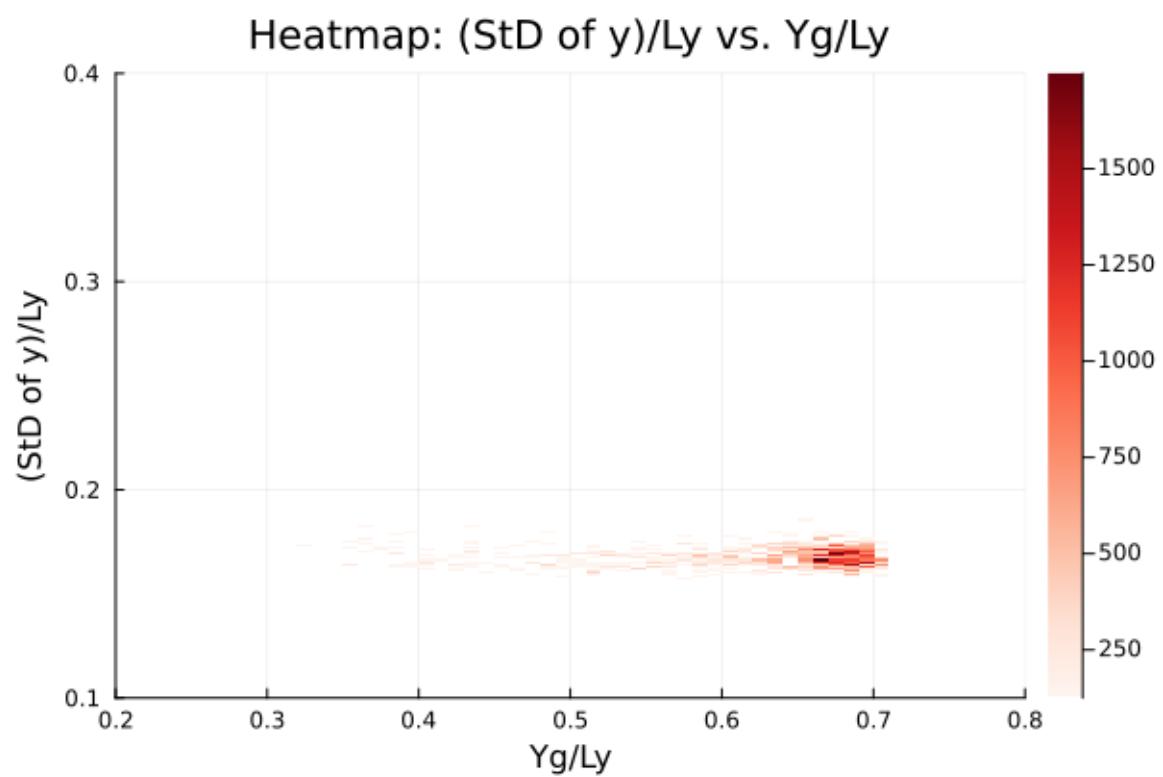


図 A.112: 热流のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.0$

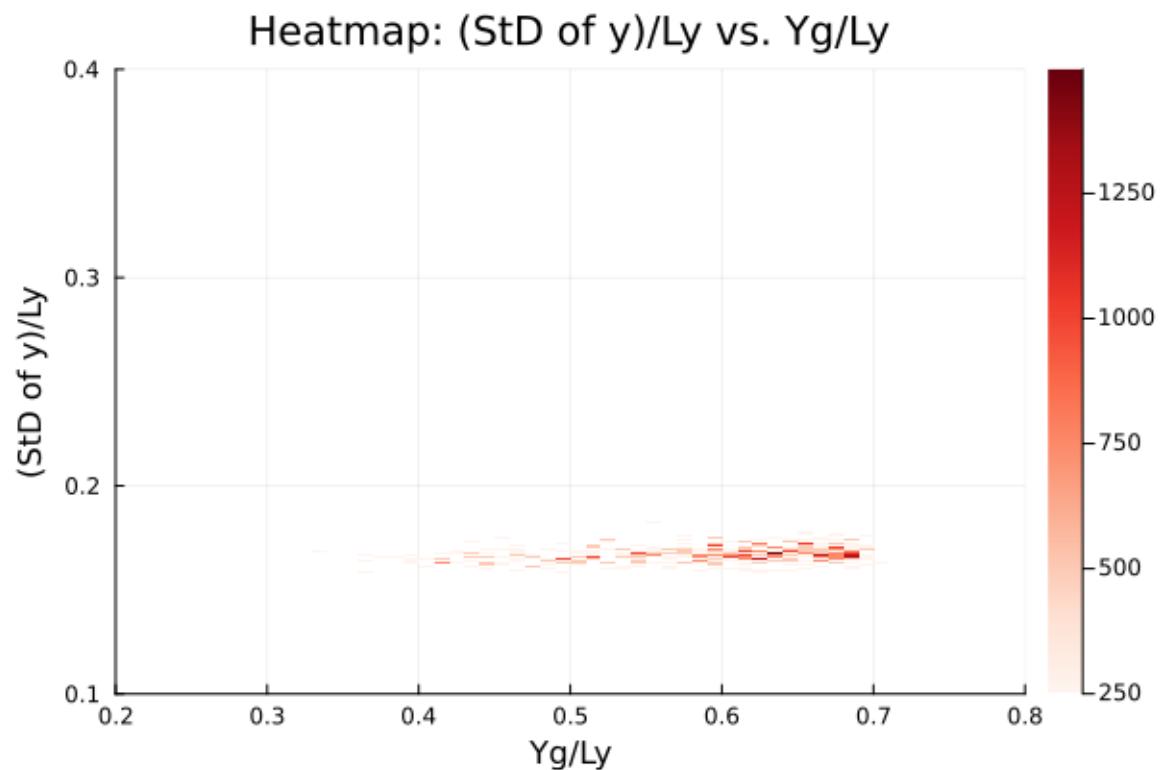


図 A.113: 热流のみをかける. $R_a = 0.0$, $R_t = 0.125$

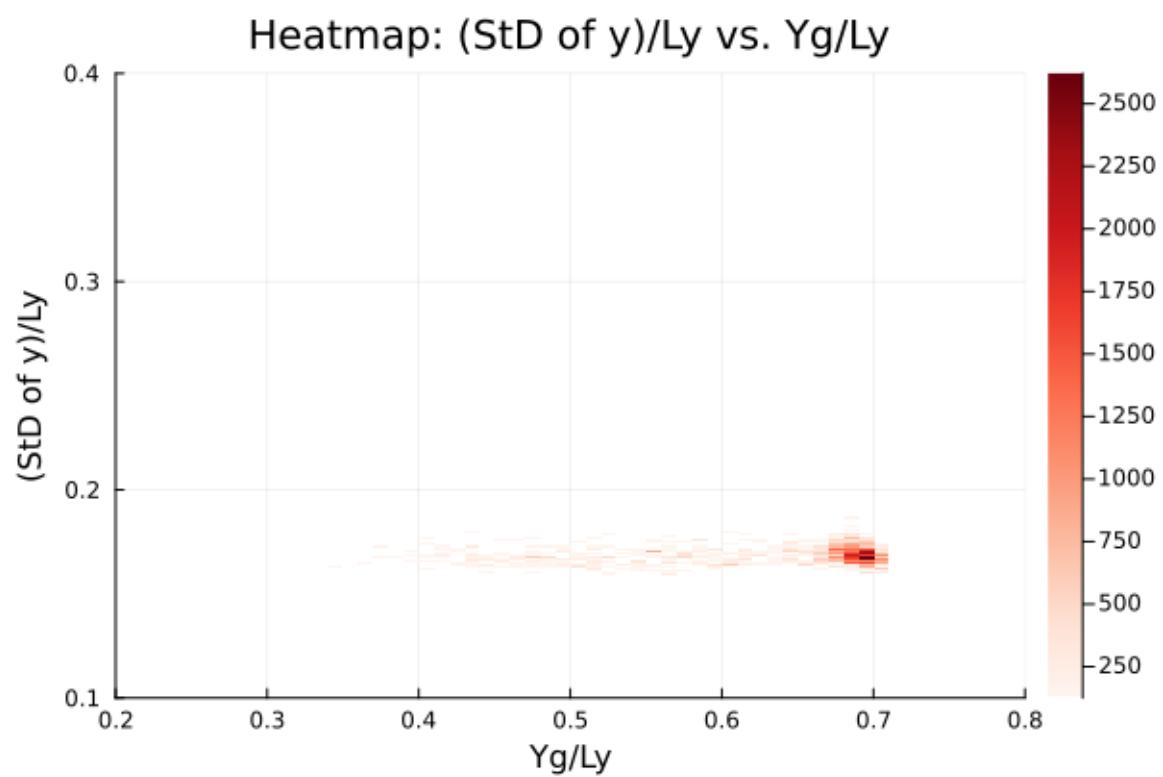


図 A.114: 热流のみをかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.125$

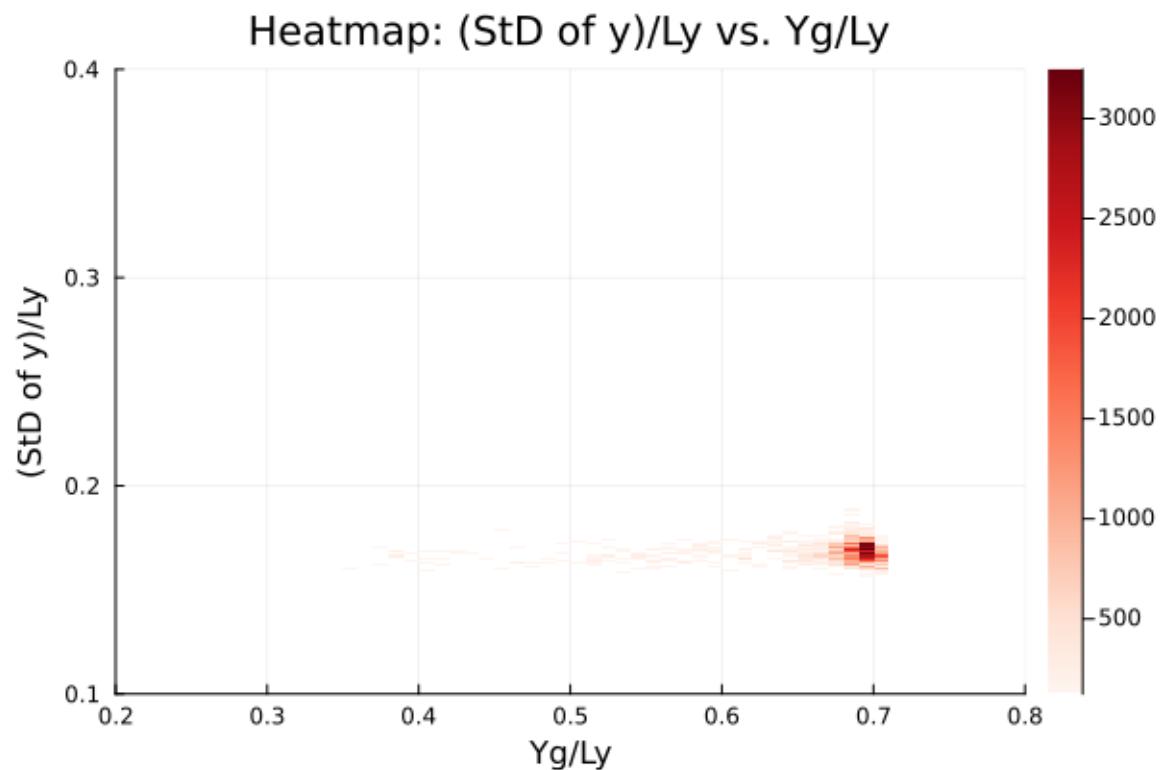


図 A.115: 热流のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.125$

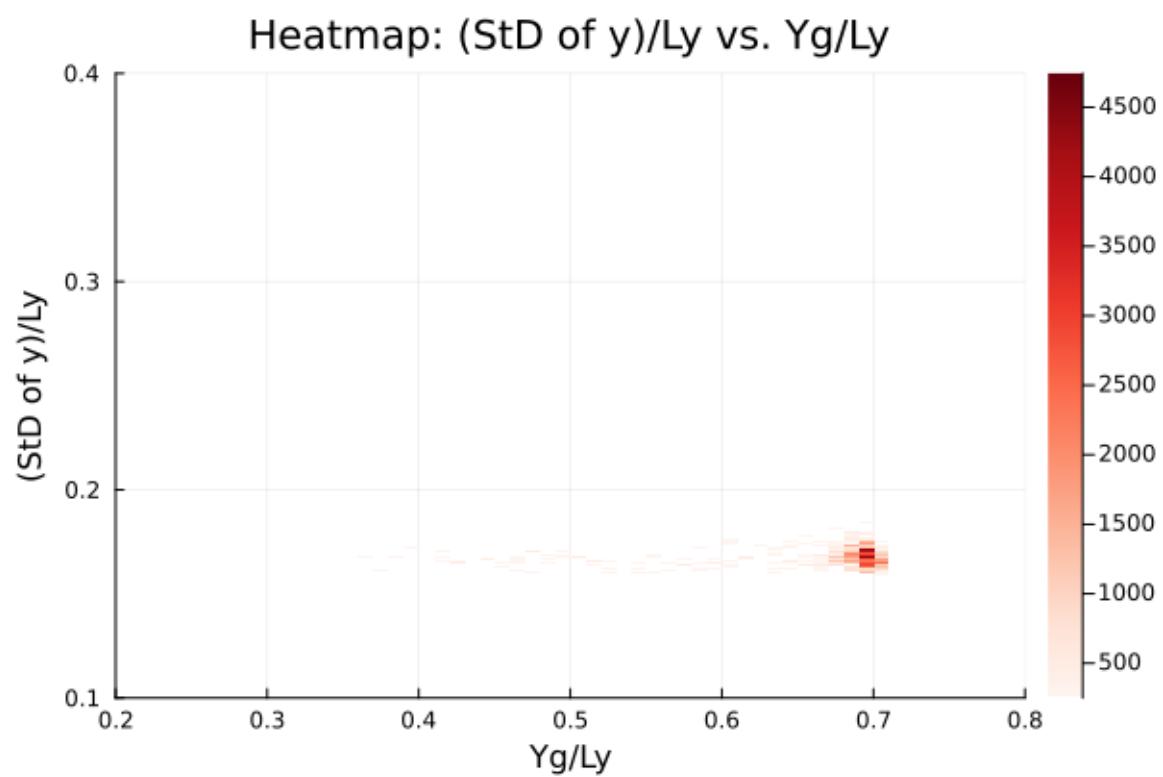


図 A.116: 热流のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.125$

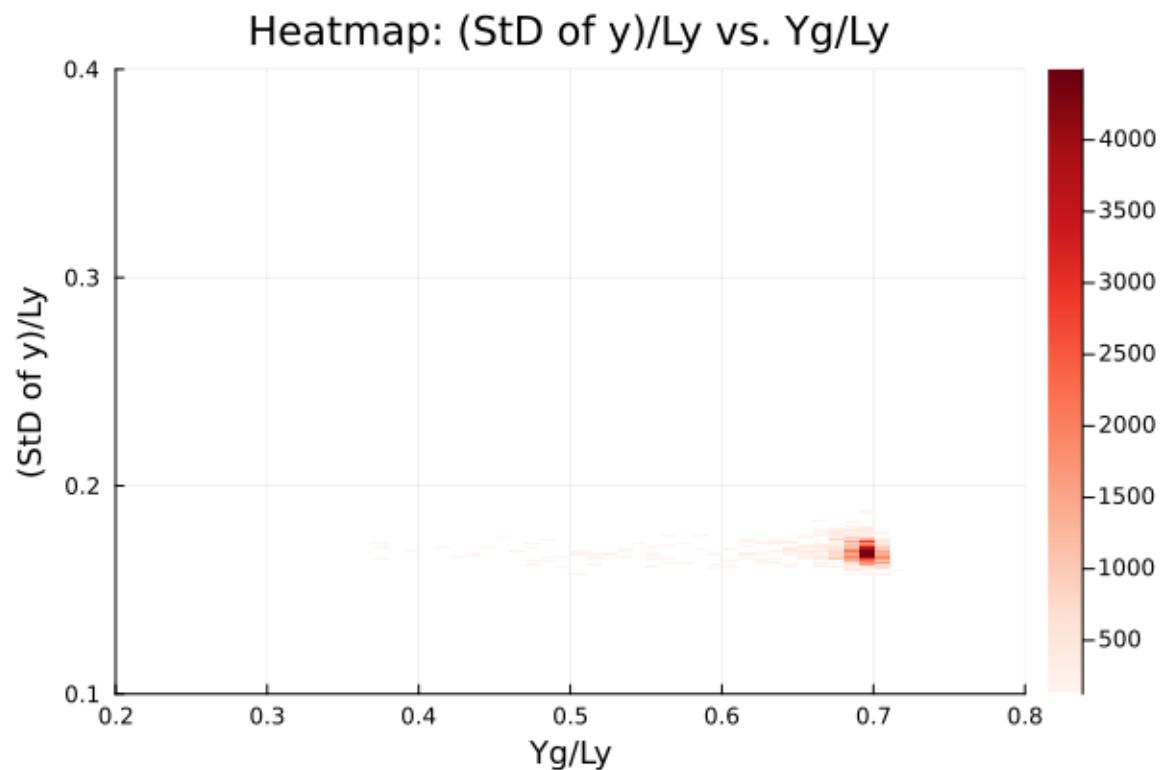


図 A.117: 热流のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.125$

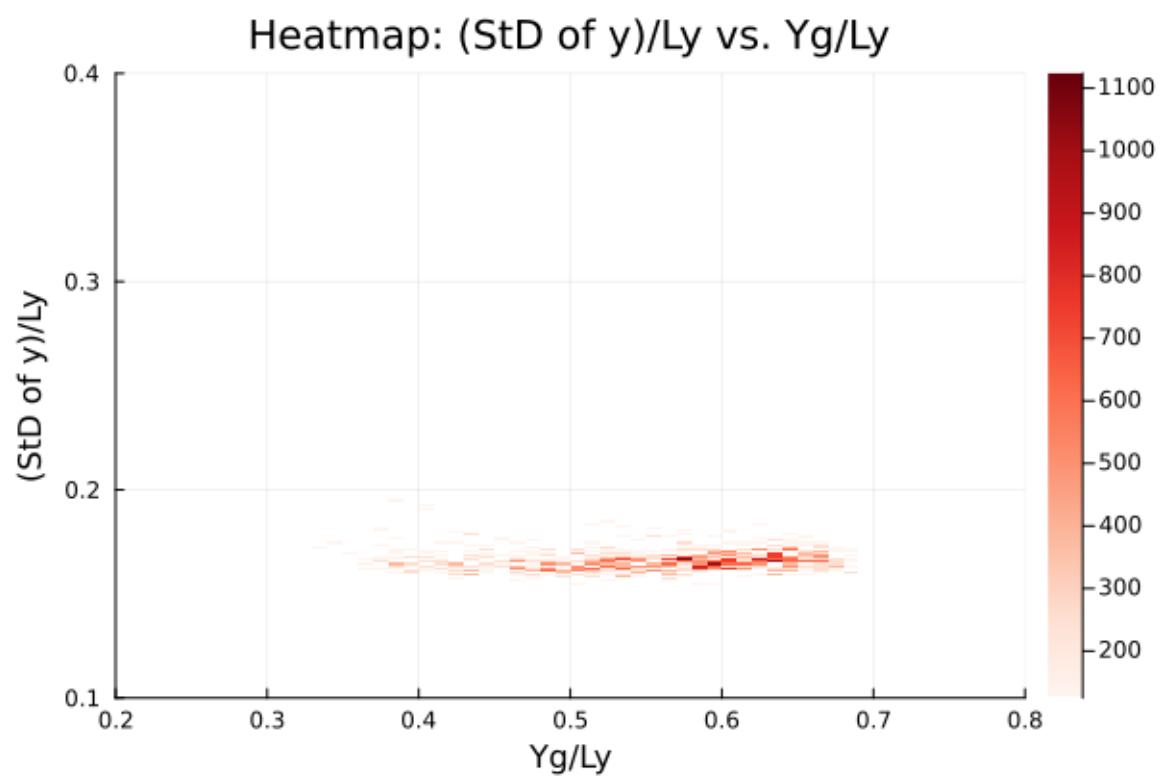


図 A.118: 热流のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.250$

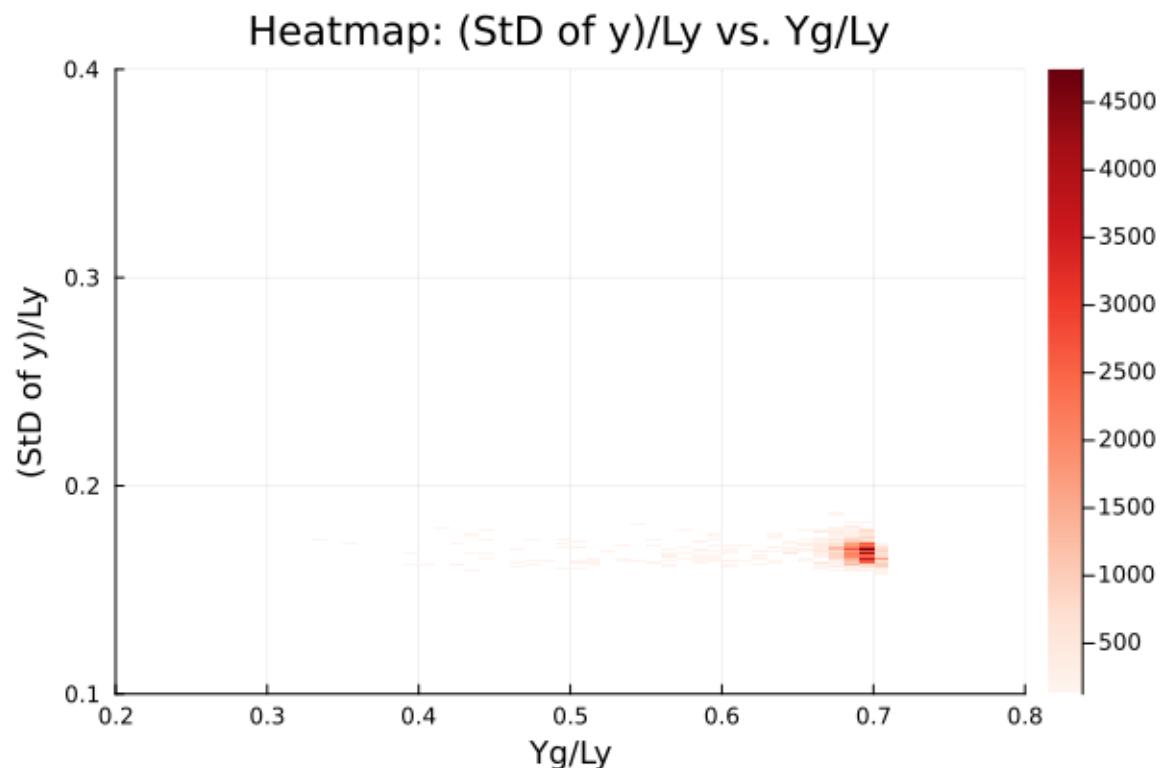


図 A.119: 热流のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.250$

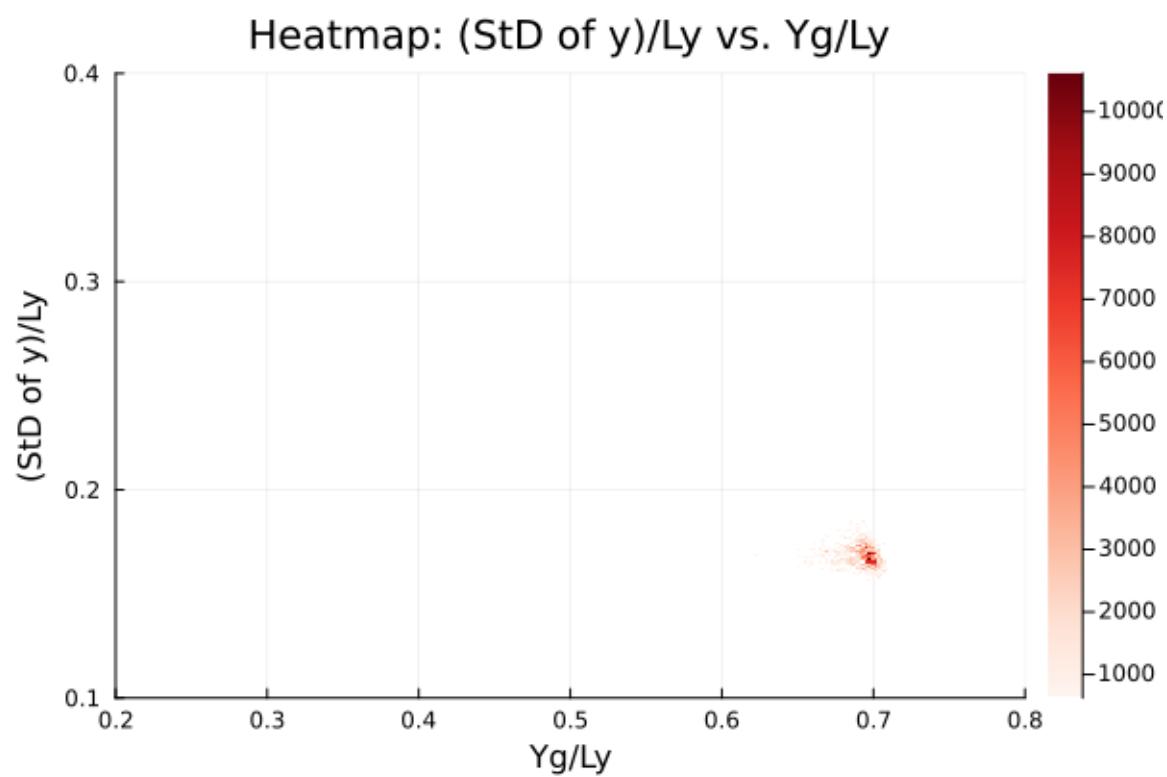


図 A.120: 热流のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.250$

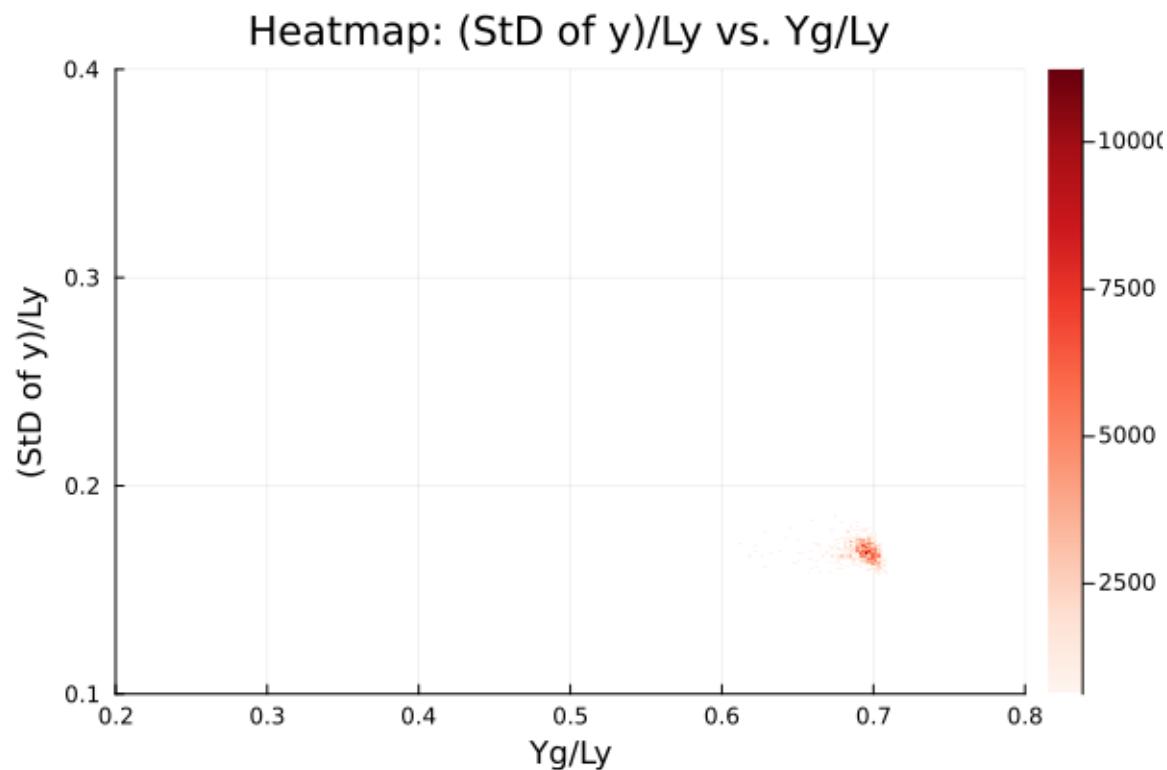


図 A.121: 热流のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.250$

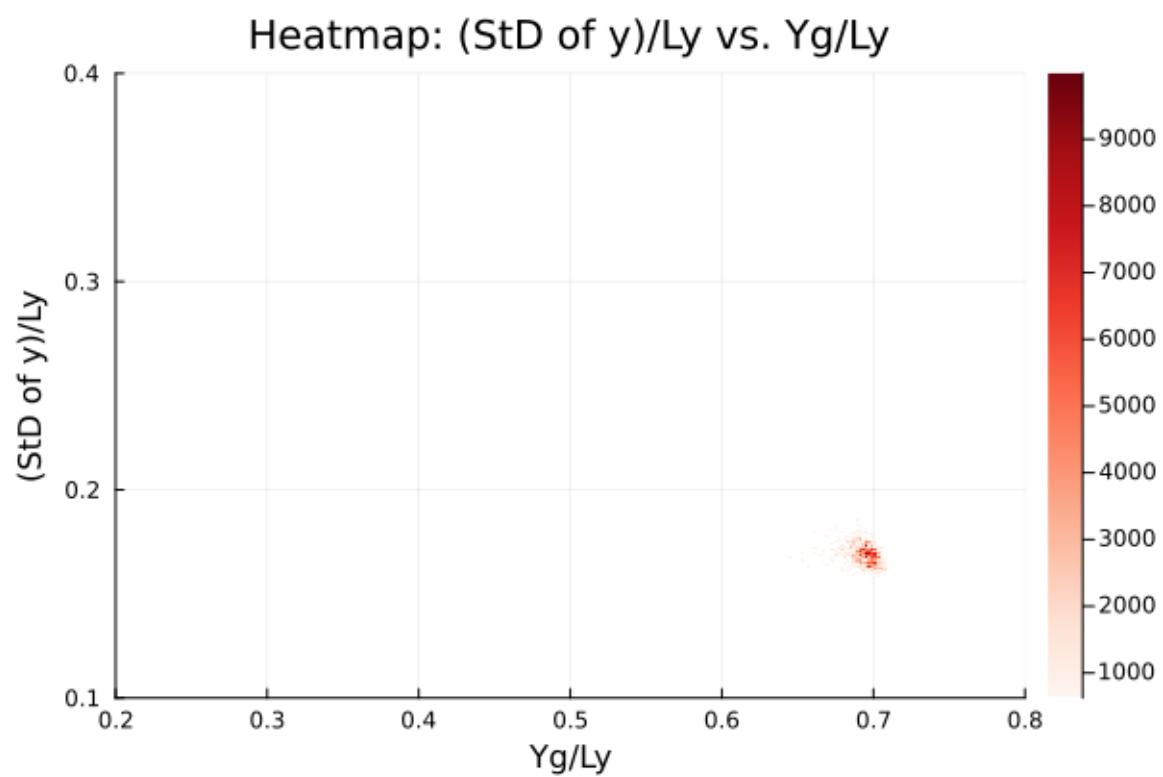


図 A.122: 热流のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.250$

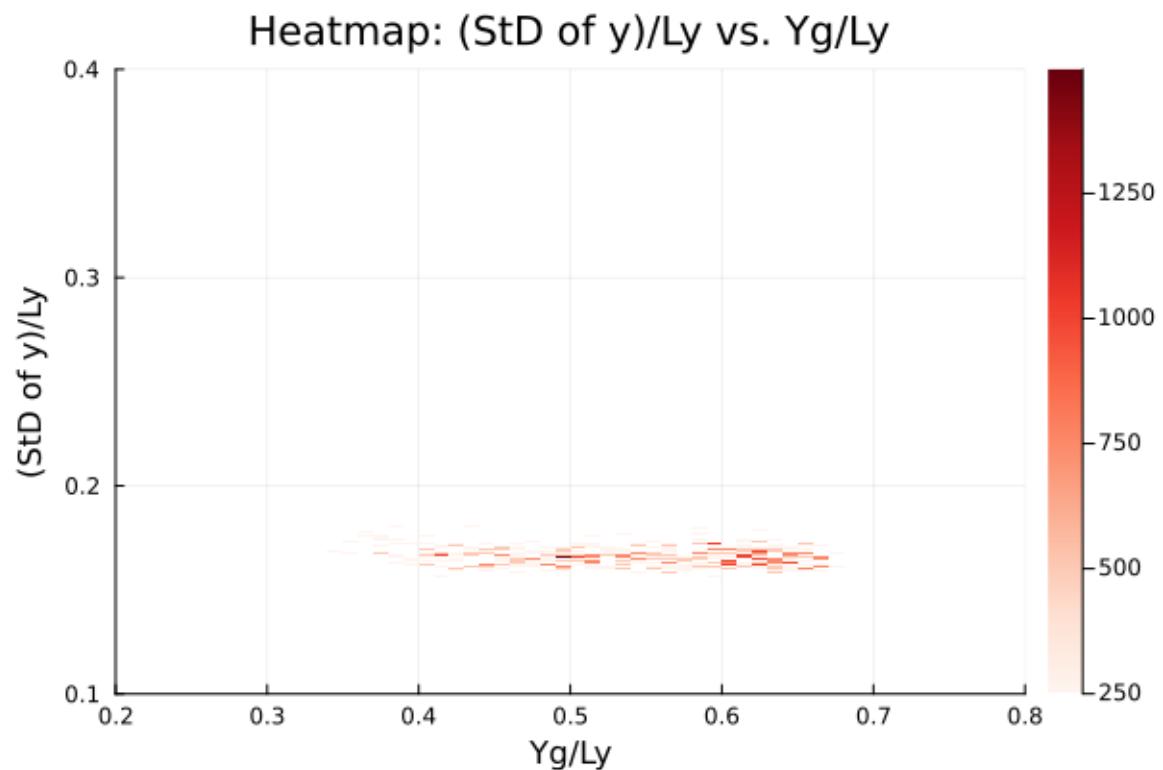


図 A.123: 热流のみをかける. $R_a = 0.0$, $R_t = 0.375$

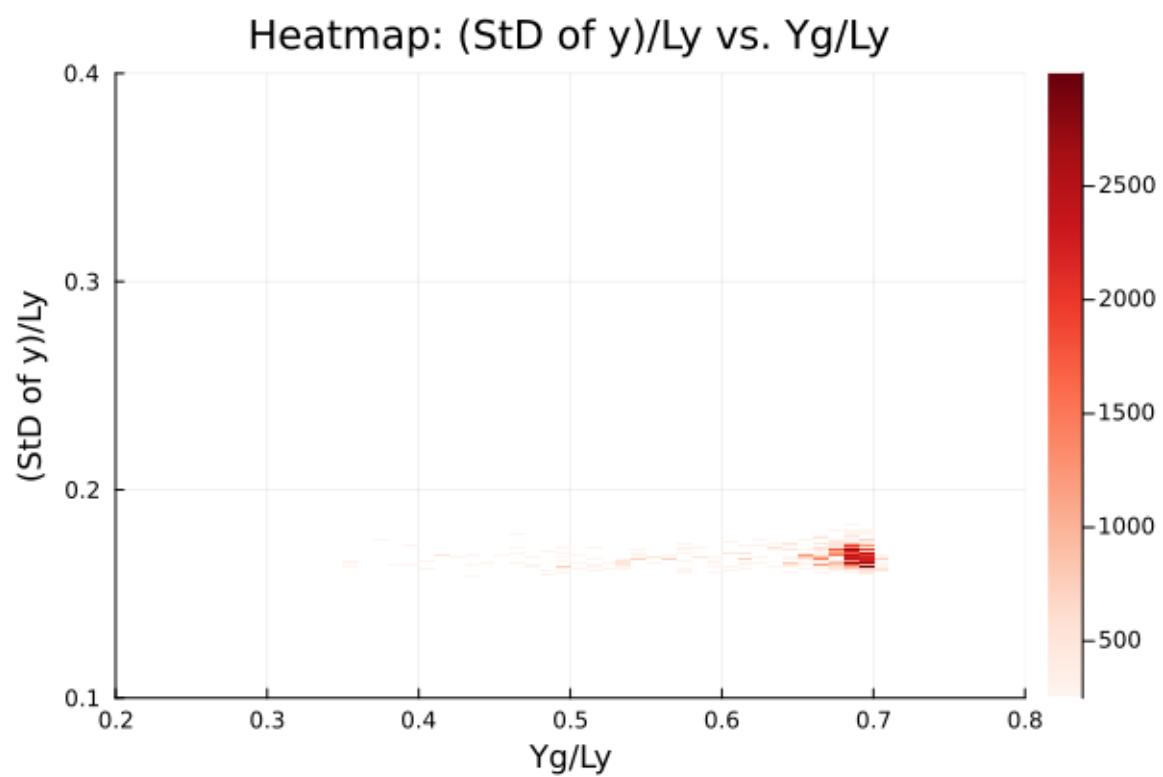


図 A.124: 热流のみをかける. $R_a = 0.469$, $R_t = 0.375$

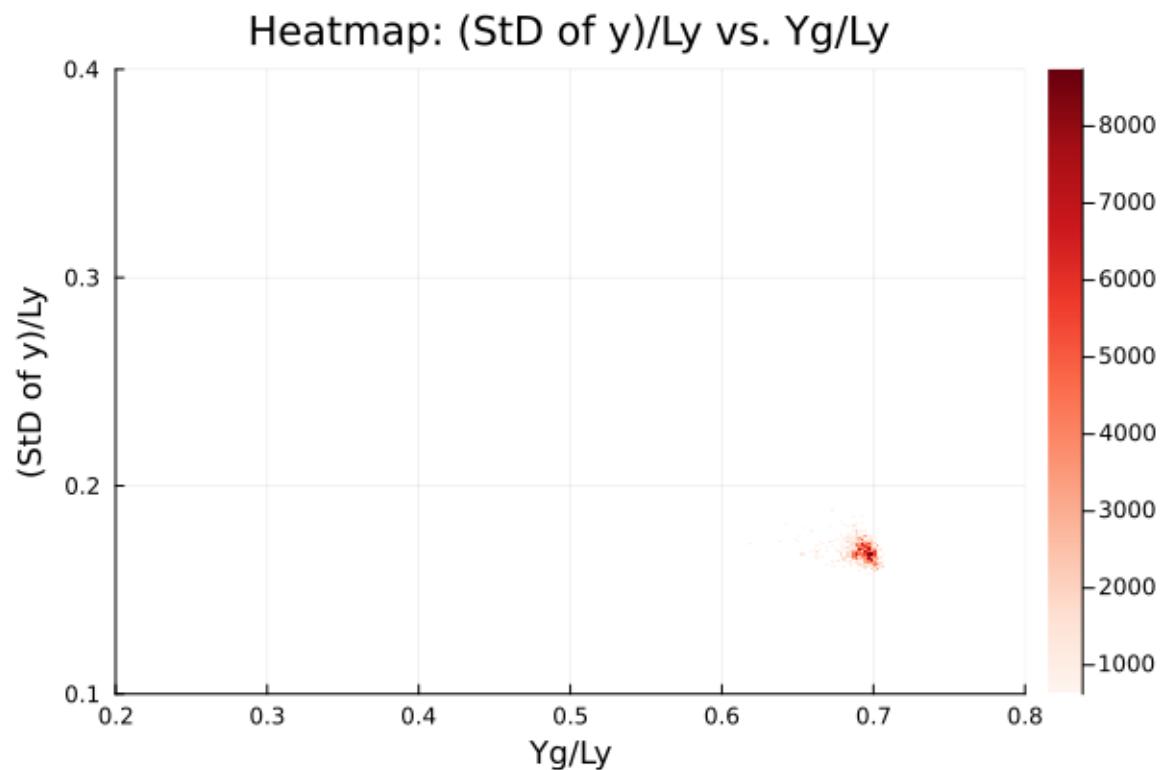


図 A.125: 热流のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.375$

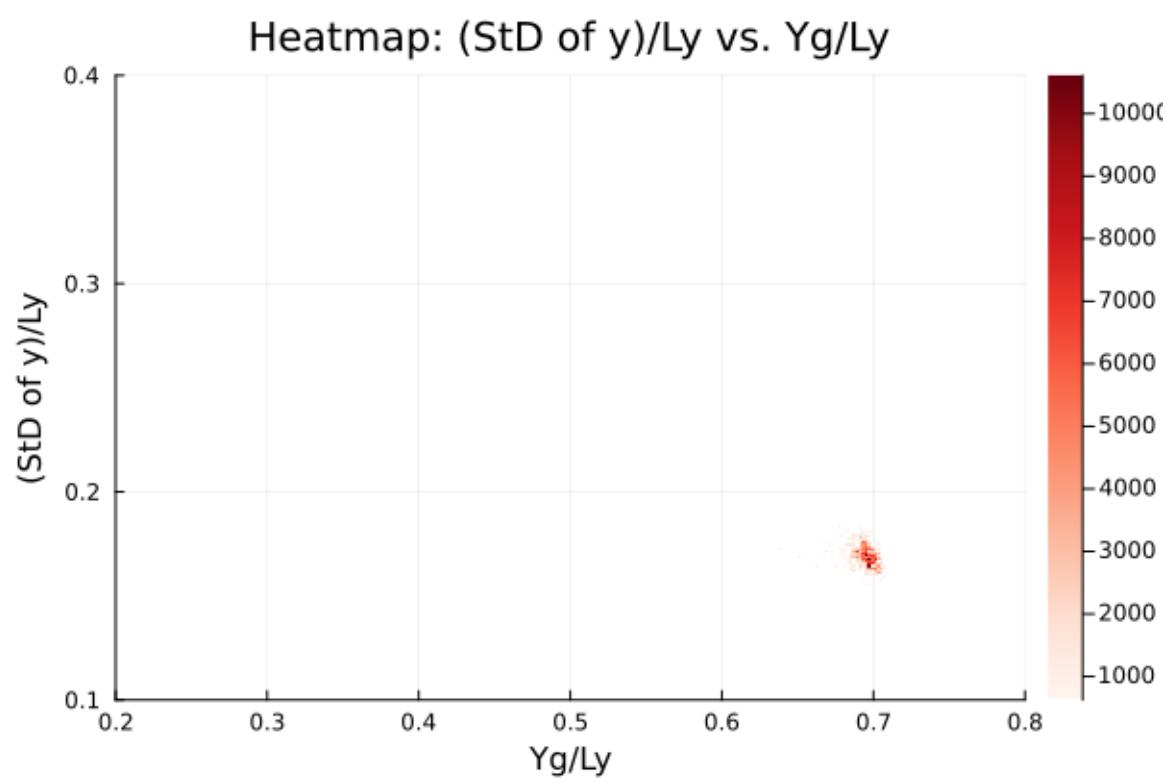


図 A.126: 热流のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.375$

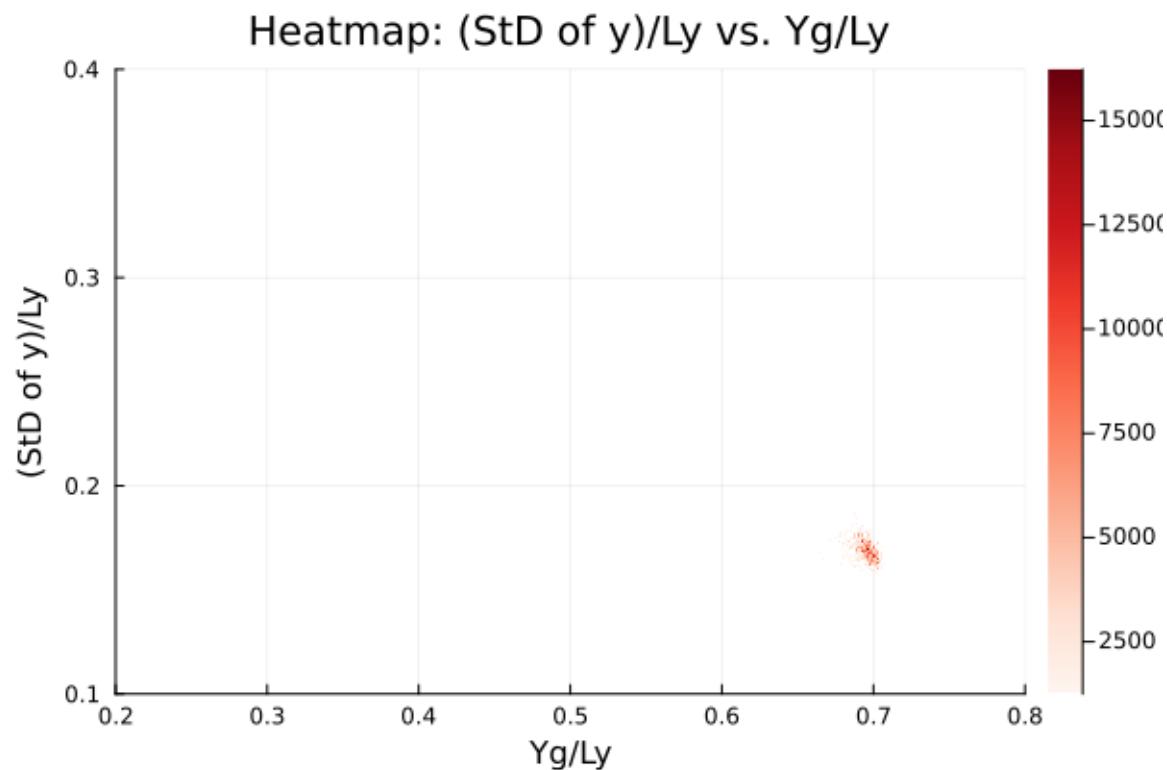


図 A.127: 热流のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.375$

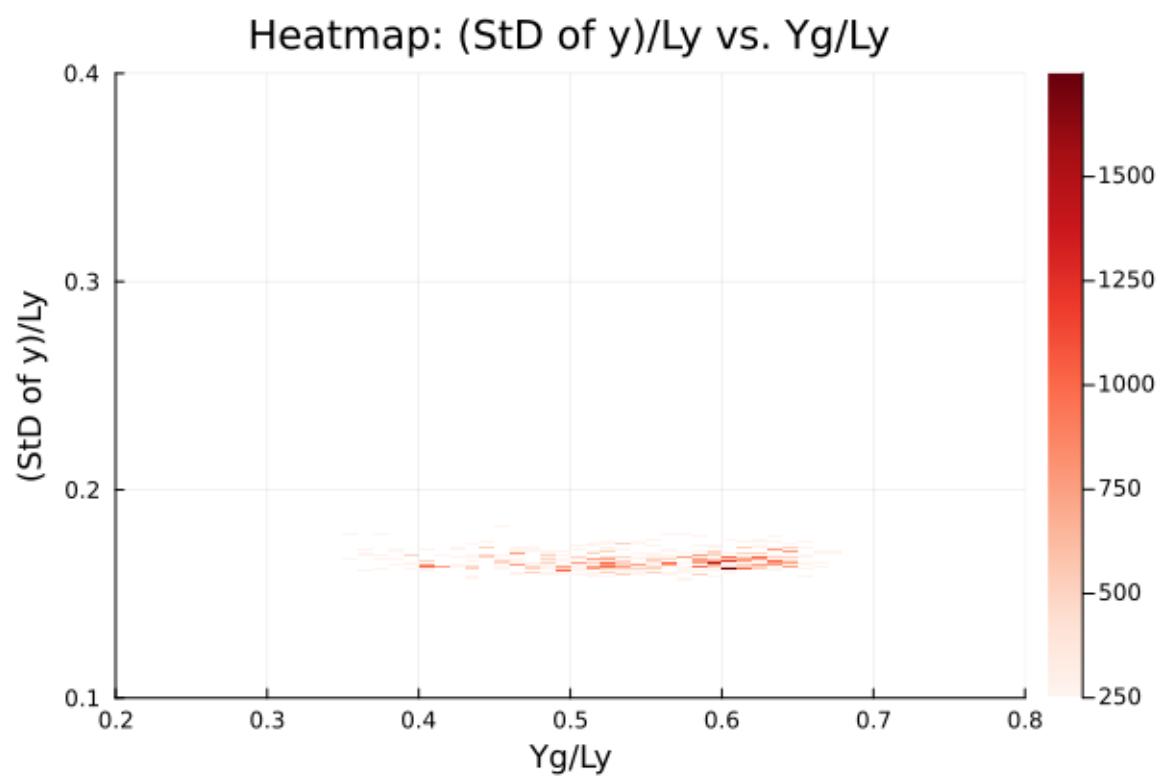


図 A.128: 热流のみをかける. $R_a = 0.0, R_t = 0.500$

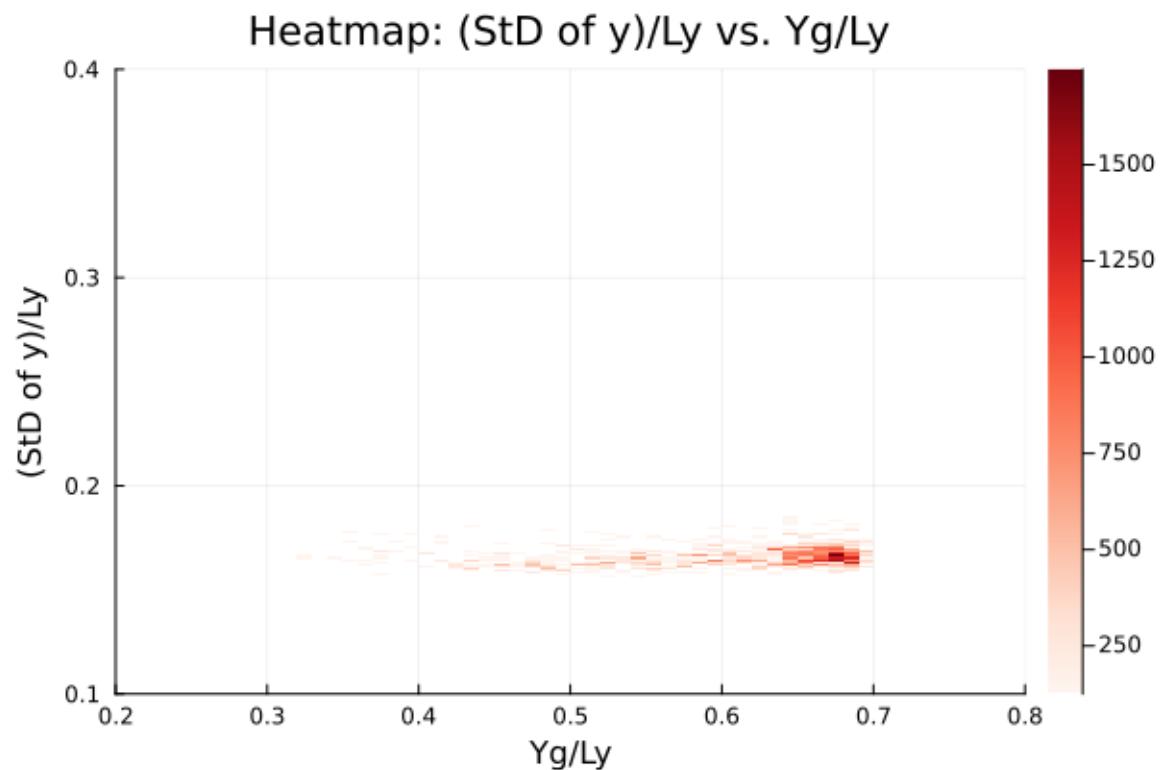


図 A.129: 热流のみをかける. $R_a = 0.469, R_t = 0.500$

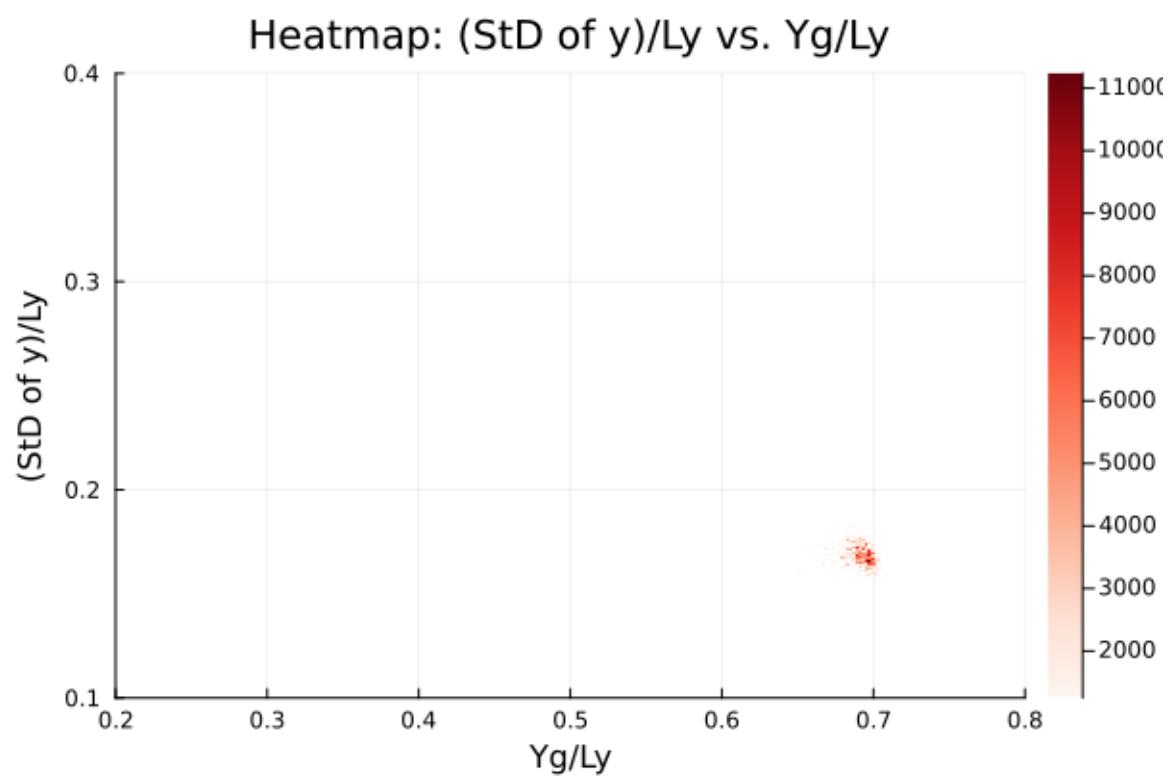


図 A.130: 热流のみをかける. $R_a = 0.938$, $R_t = 0.500$

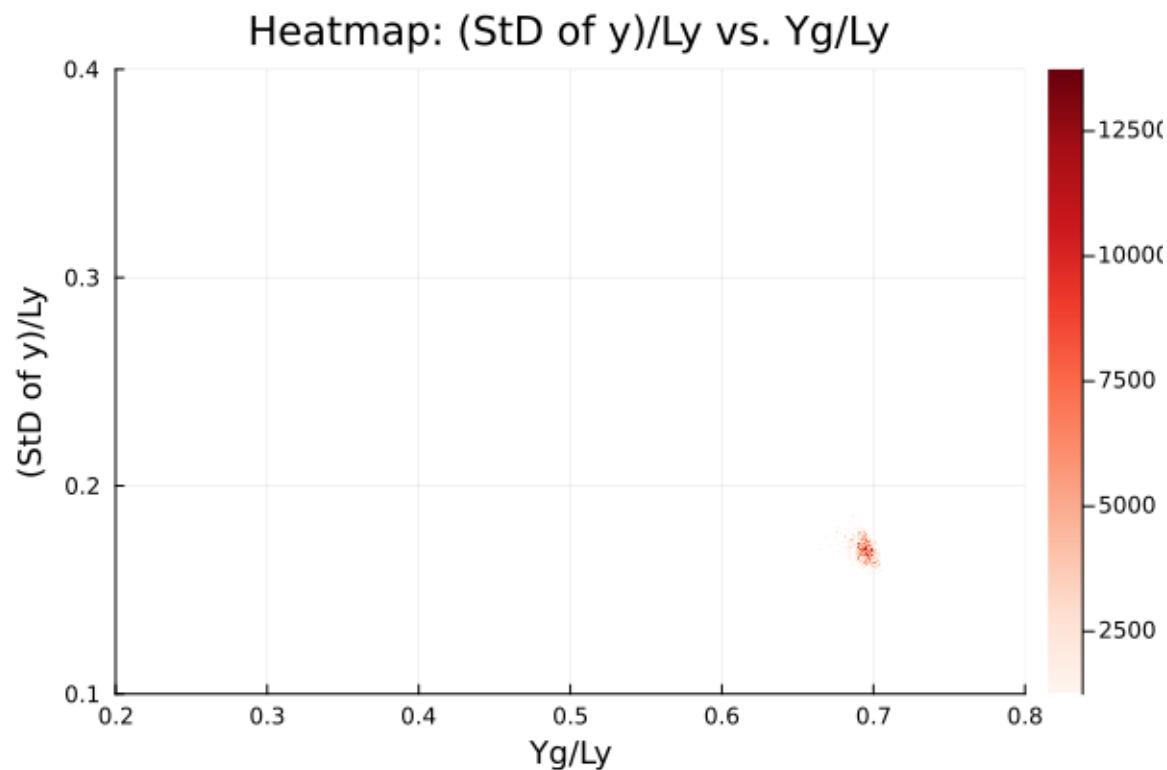


図 A.131: 热流のみをかける. $R_a = 1.408$, $R_t = 0.500$

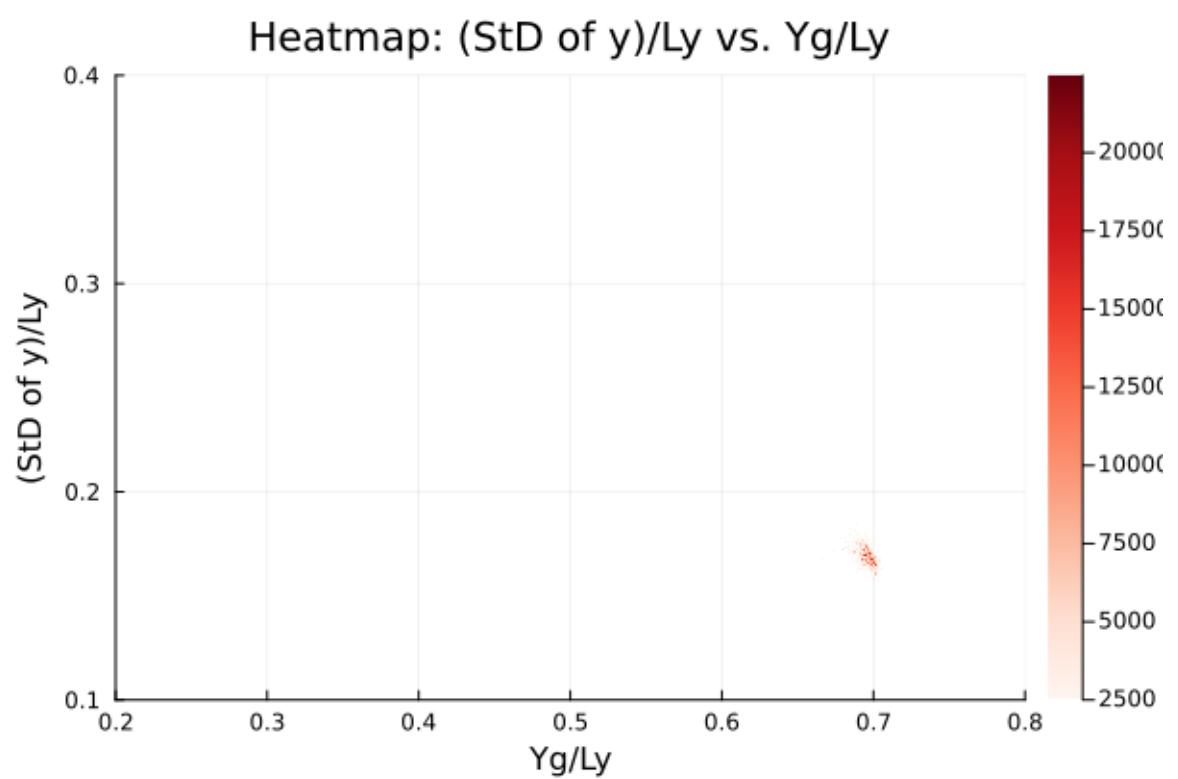


図 A.132: 热流のみをかける. $R_a = 1.877$, $R_t = 0.500$

A.5.5 重力と熱流を同時にかける (10 倍)

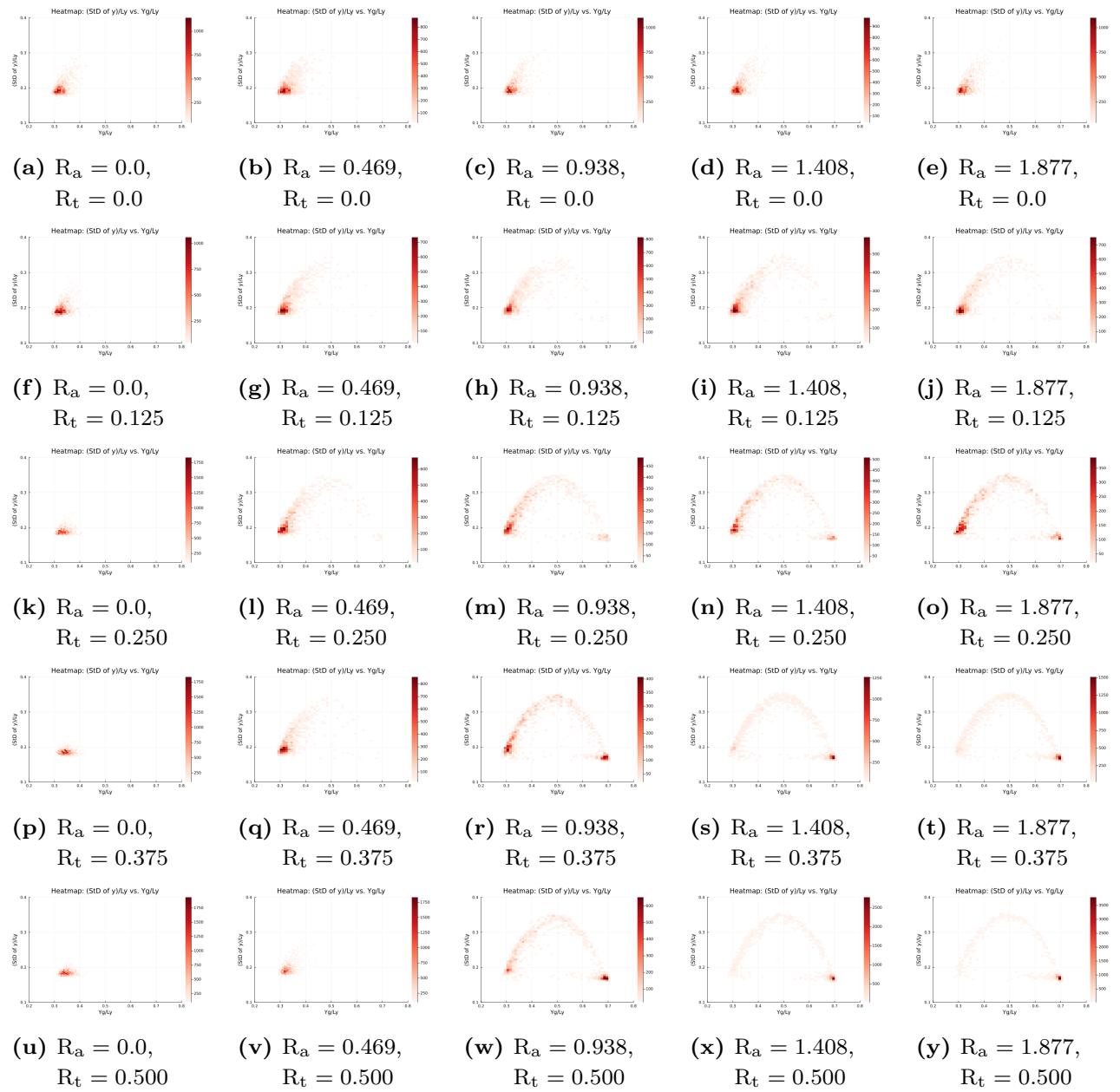


図 A.133: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとに
プロット。

A.5.6 重力を先にかけて、熱流を後からかける (10 倍)

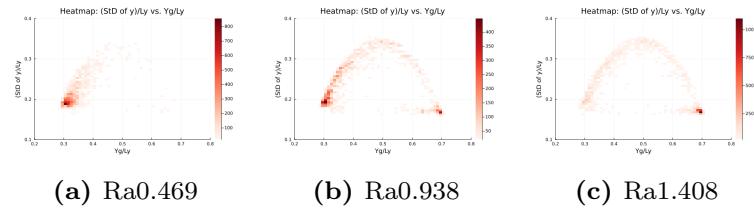


図 A.134: $t_i = 2.4 \times 10^5, t_f = 2.2 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

付録 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 内に収まりきらないファイルも含めて保存している。

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
   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 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,
#      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.

```

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
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 B.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
79   # 込む
80   tempfile = "in.temp_script_$(n)"
81   fp = open(tempfile, "w")
82   write(fp, mod_script)
83   close(fp)
84
85   # LAMMPS を実行
86   run(`myqsub -Q ness -C 4 -N g0Ra$(Ra_value) mpirun -n 4
87       lmp_mpi -log $(outputtitle).log -in $(tempfile)`)

88 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
12   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
13   レクトリに移動 .
14 - 使用済みの仮LAMMPS ファイルを一括削除 .
15
16 ## 手順
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200
201
202
203
204
205
206
207
208
209
210
211
212
213
214
215
216
217
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227
228
229
230
231
232
233
234
235
236
237
238
239
240
241
242
243
244
245
246
247
248
249
250
251
252
253
254
255
256
257
258
259
260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272
273
274
275
276
277
278
279
280
281
282
283
284
285
286
287
288
289
290
291
292
293
294
295
296
297
298
299
300
301
302
303
304
305
306
307
308
309
310
311
312
313
314
315
316
317
318
319
320
321
322
323
324
325
326
327
328
329
330
331
332
333
334
335
336
337
338
339
340
341
342
343
344
345
346
347
348
349
350
351
352
353
354
355
356
357
358
359
360
361
362
363
364
365
366
367
368
369
370
371
372
373
374
375
376
377
378
379
380
381
382
383
384
385
386
387
388
389
390
391
392
393
394
395
396
397
398
399
400
401
402
403
404
405
406
407
408
409
410
411
412
413
414
415
416
417
418
419
420
421
422
423
424
425
426
427
428
429
430
431
432
433
434
435
436
437
438
439
440
441
442
443
444
445
446
447
448
449
450
451
452
453
454
455
456
457
458
459
460
461
462
463
464
465
466
467
468
469
470
471
472
473
474
475
476
477
478
479
480
481
482
483
484
485
486
487
488
489
490
491
492
493
494
495
496
497
498
499
500
501
502
503
504
505
506
507
508
509
510
511
512
513
514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526
527
528
529
530
531
532
533
534
535
536
537
538
539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549
550
551
552
553
554
555
556
557
558
559
559
560
561
562
563
564
565
566
567
568
569
570
571
572
573
574
575
576
577
578
579
579
580
581
582
583
584
585
586
587
588
589
589
590
591
592
593
594
595
596
597
598
599
599
600
601
602
603
604
605
606
607
608
609
609
610
611
612
613
614
615
616
617
618
619
619
620
621
622
623
624
625
626
627
628
629
629
630
631
632
633
634
635
636
637
638
639
639
640
641
642
643
644
645
646
647
648
649
649
650
651
652
653
654
655
656
657
658
659
659
660
661
662
663
664
665
666
667
668
669
669
670
671
672
673
674
675
676
677
678
679
679
680
681
682
683
684
685
686
687
687
688
689
689
690
691
692
693
694
695
696
697
697
698
699
699
700
701
702
703
704
705
706
707
708
709
709
710
711
712
713
714
715
716
717
717
718
719
719
720
721
722
723
724
725
726
727
727
728
729
729
730
731
732
733
734
735
736
737
737
738
739
739
740
741
742
743
744
745
746
746
747
748
748
749
749
750
751
752
753
754
755
756
757
757
758
759
759
760
761
762
763
764
765
766
766
767
768
768
769
769
770
771
772
773
774
775
776
776
777
778
778
779
779
780
781
782
783
784
785
786
786
787
788
788
789
789
790
791
792
793
794
795
796
796
797
797
798
798
799
799
800
801
802
803
804
805
806
807
808
809
809
810
811
811
812
812
813
813
814
814
815
815
816
816
817
817
818
818
819
819
820
820
821
821
822
822
823
823
824
824
825
825
826
826
827
827
828
828
829
829
830
830
831
831
832
832
833
833
834
834
835
835
836
836
837
837
838
838
839
839
840
840
841
841
842
842
843
843
844
844
845
845
846
846
847
847
848
848
849
849
850
850
851
851
852
852
853
853
854
854
855
855
856
856
857
857
858
858
859
859
860
860
861
861
862
862
863
863
864
864
865
865
866
866
867
867
868
868
869
869
870
870
871
871
872
872
873
873
874
874
875
875
876
876
877
877
878
878
879
879
880
880
881
881
882
882
883
883
884
884
885
885
886
886
887
887
888
888
889
889
890
890
891
891
892
892
893
893
894
894
895
895
896
896
897
897
898
898
899
899
900
900
901
901
902
902
903
903
904
904
905
905
906
906
907
907
908
908
909
909
910
910
911
911
912
912
913
913
914
914
915
915
916
916
917
917
918
918
919
919
920
920
921
921
922
922
923
923
924
924
925
925
926
926
927
927
928
928
929
929
930
930
931
931
932
932
933
933
934
934
935
935
936
936
937
937
938
938
939
939
940
940
941
941
942
942
943
943
944
944
945
945
946
946
947
947
948
948
949
949
950
950
951
951
952
952
953
953
954
954
955
955
956
956
957
957
958
958
959
959
960
960
961
961
962
962
963
963
964
964
965
965
966
966
967
967
968
968
969
969
970
970
971
971
972
972
973
973
974
974
975
975
976
976
977
977
978
978
979
979
980
980
981
981
982
982
983
983
984
984
985
985
986
986
987
987
988
988
989
989
990
990
991
991
992
992
993
993
994
994
995
995
996
996
997
997
998
998
999
999
1000
1000
1001
1001
1002
1002
1003
1003
1004
1004
1005
1005
1006
1006
1007
1007
1008
1008
1009
1009
1010
1010
1011
1011
1012
1012
1013
1013
1014
1014
1015
1015
1016
1016
1017
1017
1018
1018
1019
1019
1020
1020
1021
1021
1022
1022
1023
1023
1024
1024
1025
1025
1026
1026
1027
1027
1028
1028
1029
1029
1030
1030
1031
1031
1032
1032
1033
1033
1034
1034
1035
1035
1036
1036
1037
1037
1038
1038
1039
1039
1040
1040
1041
1041
1042
1042
1043
1043
1044
1044
1045
1045
1046
1046
1047
1047
1048
1048
1049
1049
1050
1050
1051
1051
1052
1052
1053
1053
1054
1054
1055
1055
1056
1056
1057
1057
1058
1058
1059
1059
1060
1060
1061
1061
1062
1062
1063
1063
1064
1064
1065
1065
1066
1066
1067
1067
1068
1068
1069
1069
1070
1070
1071
1071
1072
1072
1073
1073
1074
1074
1075
1075
1076
1076
1077
1077
1078
1078
1079
1079
1080
1080
1081
1081
1082
1082
1083
1083
1084
1084
1085
1085
1086
1086
1087
1087
1088
1088
1089
1089
1090
1090
1091
1091
1092
1092
1093
1093
1094
1094
1095
1095
1096
1096
1097
1097
1098
1098
1099
1099
1100
1100
1101
1101
1102
1102
1103
1103
1104
1104
1105
1105
1106
1106
1107
1107
1108
1108
1109
1109
1110
1110
1111
1111
1112
1112
1113
1113
1114
1114
1115
1115
1116
1116
1117
1117
1118
1118
1119
1119
1120
1120
1121
1121
1122
1122
1123
1123
1124
1124
1125
1125
1126
1126
1127
1127
1128
1128
1129
1129
1130
1130
1131
1131
1132
1132
1133
1133
1134
1134
1135
1135
1136
1136
1137
1137
1138
1138
1139
1139
1140
1140
1141
1141
1142
1142
1143
1143
1144
1144
1145
1145
1146
1146
1147
1147
1148
1148
1149
1149
1150
1150
1151
1151
1152
1152
1153
1153
1154
1154
1155
1155
1156
1156
1157
1157
1158
1158
1159
1159
1160
1160
1161
1161
1162
1162
1163
1163
1164
1164
1165
1165
1166
1166
1167
1167
1168
1168
1169
1169
1170
1170
1171
1171
1172
1172
1173
1173
1174
1174
1175
1175
1176
1176
1177
1177
1178
1178
1179
1179
1180
1180
1181
1181
1182
1182
1183
1183
1184
1184
1185
1185
1186
1186
1187
1187
1188
1188
1189
1189
1190
1190
1191
1191
1192
1192
1193
1193
1194
1194
1195
1195
1196
1196
1197
1197
1198
1198
1199
1199
1200
1200
1201
1201
1202
1202
1203
1203
1204
1204
1205
1205
1206
1206
1207
1207
1208
1208
1209
1209
1210
1210
1211
1211
1212
1212
1213
1213
1214
1214
1215
1215
1216
1216
1217
1217
1218
1218
1219
1219
1220
1220
1221
1221
1222
1222
1223
1223
1224
1224
1225
1225
1226
1226
1227
1227
1228
1228
1229
1229
1230
1230
1231
1231
1232
1232
1233
1233
1234
1234
1235
1235
1236
1236
1237
1237
1238
1238
1239
1239
1240
1240
1241
1241
1242
1242
1243
1243
1244
1244
1245
1245
1246
1246
1247
1247
1248
1248
1249
1249
1250
1250
1251
1251
1252
1252
1253
1253
1254
1254
1255
1255
1256
1256
1257
1257
1258
1258
1259
1259
1260
1260
1261
1261
1262
1262
1263
1263
1264
1264
1265
1265
1266
1266
1267
1267
1268
1268
1269
1269
1270
1270
1271
1271
1272
1272
1273
1273
1274
1274
1275
1275
1276
1276
1277
1277
1278
1278
1279
1279
1280
1280
1281
1281
1282
1282
1283
1283
1284
1284
1285
1285
1286
1286
1287
1287
1288
1288
1289
1289
1290
1290
1291
1291
1292
1292
1293
1293
1294
1294
1295
1295
1296
1296
1297
1297
1298
1298
1299
1299
1300
1300
1301
1301
1302
1302
1303
1303
1304
1304
1305
1305
1306
1306
1307
1307
1308
1308
1309
1309
1310
1310
1311
1311
1312
1312
1313
1313
1314
1314
1315
1315
1316
1316
1317
1317
1318
1318
1319
1319
1320
1320
1321
1321
1322
1322
1323
1323
1324
1324
1325
1325
1326
1326
1327
1327
1328
1328
1329
1329
1330
1330
1331
1331
1332
1332
1333
1333
1334
1334
1335
1335
1336
1336
1337
1337
1338
1338
1339
1339
1340
1340
1341
1341
1342
1342
1343
1343
1344
1344
1345
1345
1346
1346
1347
1347
1348
1348
1349
1349
1350
1350
1351
1351
1352
1352
1353
1353
1354
1354
1355
1355
1356
1356
1357
1357
1358
1358
1359
1359
1360
1360
1361
1361
1362
1362
1363
1363
1364
1364
1365
1365
1366
1366
1367
1367
1368
1368
1369
1369
1370
1370
1371
1371
1372
1372
1373
1373
1374
1374
1375
1375
1376
1376
1377
1377
1378
1378
1379
1379
1380
1380
1381
1381
1382
1382
1383
1383
1384
1384
1385
1385
1386
1386
1387
1387
1388
1388
1389
1389
1390
1390
1391
1391
1392
1392
1393
1393
1394
1394
1395
1395
1396
1396
1397
1397
1398
1398
1399
1399
1400
1400
1401
1401
1402
1402
1403
1403
1404
1404
1405
1405
1406
1406
1407
1407
1408
1408
1409
1409
1410
1410
1411
1411
1412
1412
1413
1413
1414
1414
1415
1415
1416
1416
1417
1417
1418
1418
1419
1419
1420
1420
1421
1421
1422
1422
1423
1423
1424
1424
1425
1425
1426
1426
1427
1427
1428
1428
1429
1429
1430
1430
1431
1431
1432
1432
1433
1433
1434
1434
1435
1435
1436
1436
1437
1437
1438
1438
1439
1439
1440
1440
1441
1441
1442
1442
1443
1443
1444
1444
1445
1445
1446
1446
1447
1447
1448
1448
1449
1449
1450
1450
1451
1451
1452
1452
1453
1453
1454
1454
1455
1455
1456
1456
1457
1457
1458
1458
1459
1459
1460
1460
1461
1461
1462
1462
1463
1463
1464
1464
1465
1465
1466
1466
1467
1467
1468
1468
1469
1469
1470
1470
1471
1471
1472
1472
1473
1473
1474
1474
1475
1475
1476
1476
1477
1477
1478
1478
1479
1479
1480
1480
1481
1481
1482
1482
1483
1483
1484
1484
1485
1485
1486
1486
1487
1487
1488
1488
1489
1489
1490
1490
1491
1491
1492
1492
1493
1493
1494
1494
1495
1495
1496
1496
1497
1497
1498
1498
1499
1499
1500
1500
1501
1501
1502
1502
1503
1503
1504
1504
1505
1505
1506
1506
1507
1507
1508
1508
1509
1509
1510
1510
1511
1511
1512
1512
1513
1513
1514
1514
1515
1515
1516
1516
1517
1517
1518
1518
1519
1519
1520
1520
1521
1521
1522
1522
1523
1523
1524
1524
1525
1525
1526
1526
1527
1527
1528
1528
1529
1529
1530
1530
1531
1531
1532
1532
1533
1533
1534
1534
1535
1535
1536
1536
1537
1537
1538
1538
1539
1539
1540
1540
1541
1541
1542
1542
1543
1543
1544
1544
1545
1545
1546
1546
1547
1547
1548
1548
1549
1549
1550
1550
1551
1551
1552
1552
1553
1553
1554
1554
1555
1555
1556
1556
1557
1557
1558
1558
1559
1559
1560
1560
1561
1561
1562
1562
1563
1563
1564
1564
1565
1565
1566
1566
1567
1567
1568
1568
1569
1569
1570
1570
1571
1571
1572
1572
1573
1573
1574
1574
1575
1575
1576
1576
1577
1577
1578
1578
1579
1579
1580
1580
1581
1581
1582
1582
1583
1583
1584
1584

```

```

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

```

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тен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тен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тен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; ε w=$(round(epsilon_wall,digits=1)) ε , σ w=$(round(sigma_wall,digits=1)) σ , rcw=$(round((2^(1/6))+Ra,digits=2)) σ w =$(round(((2^(1/6))+Ra)*sigma_wall,digits=2)) σ ", linestyle=:dash)
51 end
52
53 display(plot!())
54 # savefig("")
55 ccall(:jl_tty_set_mode, Int32, (Ptr{Cvoid}, Int32), stdin.
56     handle, true)
57 read(stdin, 1)

```

ソースコード B.7: Plot_time_all.jl

```

1 # ある
yaml ディレクトリのファイル全ての時系列グラフをそれぞれプロットして
, 画像を生成.
2
3 using Plots
4 using YAML
5 using FilePaths
6
7 function plot_data(data)
8     time = [entry["time"] for entry in data]
9     Yg_value = [entry["Yg"] for entry in data]
10
11    plot(time, Yg_value / 80, label="Yg", legend=:topleft)

```

```

12     vline!([4e4],label="")
13     xlabel!("time")
14     ylabel!("Yg/Ly")
15     title!("Yg vs. time")
16     ylims!(0.2, 0.8)
17 end
18
19 # 対象ディレクトリ内の YAML ファイルを取得
20 yaml_directory = "/Users/2023_2gou/Desktop/r_yamamoto/
    Research/outputdir_pinkimac/231114outputdir/yamldir/"
21 yaml_files = filter(x -> occursin(".yaml", x), readdir(
    yaml_directory))
22
23 for yaml_file in yaml_files
24     yaml_file_path = joinpath(yaml_directory, yaml_file)
25     data = YAML.load_file(yaml_file_path)
26     plot_data(data)
27
28     # 画像のファイル名を生成
29     file_name_without_ext = splitext(yaml_file)[1]
30     output_file_name = file_name_without_ext * ".png"
31
32     # 画像の保存
33     savefig(output_file_name)
34
35     # プロットをクリア
36     plot!()
37 end

```

参考文献

- [1] N. Nakagawa A. Yoshida and S. Sasa. arxiv:2310.05817.
- [2] 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.
- [3] 蔵本由紀. リズム現象の世界. 東京大学出版会, 2013.