

重力と熱流下における粒子集団の様相

理学部理学科物理学コース 学籍番号 20S2035Y 山本 凜

最終更新日: 2023 年 12 月 29 日

目次

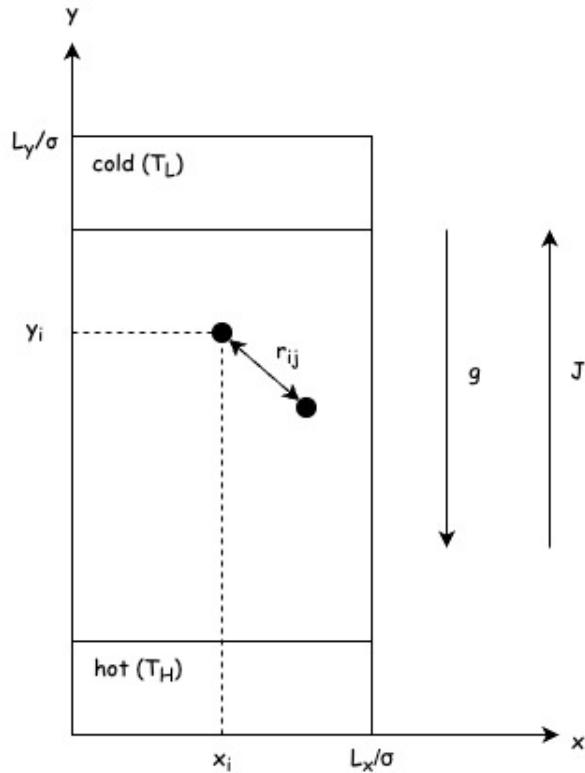
1	系の設定	3
1.1	ハミルトニアン	3
1.1.1	粒子-粒子間相互作用ポテンシャル	4
1.1.2	周期境界条件と最近接イメージ規約 [1]	4
1.1.3	壁-粒子間相互作用ポテンシャル	5
1.2	熱流	6
1.2.1	温度制御	6
2	実験	7
2.1	追実験	9
2.2	重力と熱流を同時にかける	11
2.3	重力を先にかけて、熱流を後からかける	14
2.4	重力のみをかける	15
2.5	熱流のみをかける	15
3	分析	15
3.1	R_a, R_t マップ	15
3.2	周期性	16
3.3	サイクル	18
付録 A	ソースコード	29

1 系の設定

この章では、問題とする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)

図 1



1.1 ハミルトニアン

結論は、

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

以降、本節はこれに至るまでの過程を述べる。

1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル

シミュレーションを行う際に、典型的な粒子間相互作用ポテンシャルとして、12-6 Lennard-Jones Potential を採用する。

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

シミュレーション上では、カットオフ長 $r_{\text{cut}}^{\text{pair}} = 3\sigma$ とポテンシャルのシフトアップを考慮して

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

のように書き換えたポテンシャルを用いている。

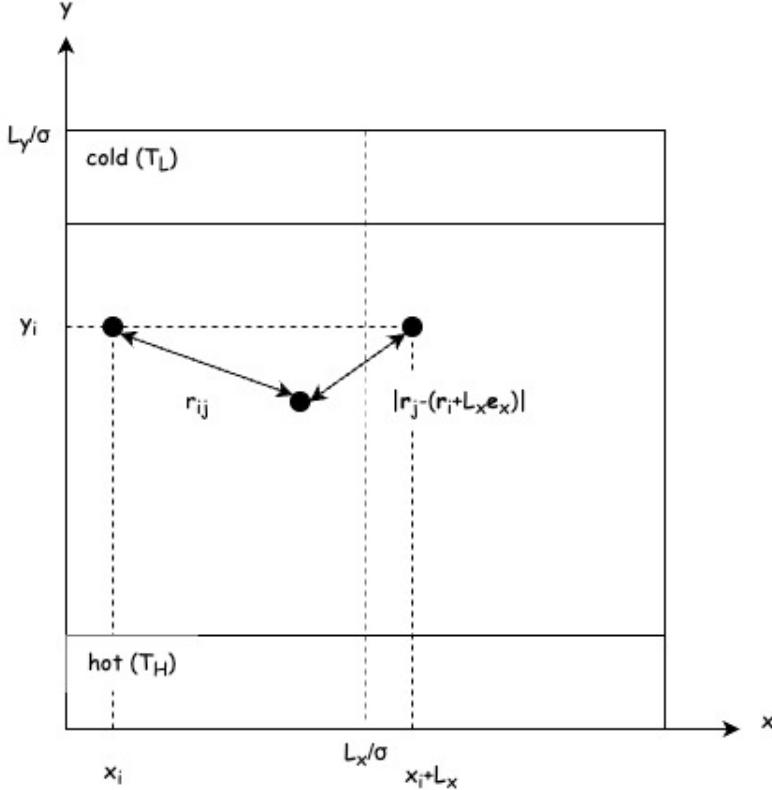
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約 [1]

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

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

ここで、 $n_x = 0$ ；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 2



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

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

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

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

1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル

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

パラメータは以下のようにする。

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

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 軸方向垂直に壁がついている. よって, 壁ポテンシャルは

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

のように書ける. これまでのことより, ハミルトニアンは以下のように書き表せる.

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

1.2 热流

langevin 热浴に侵入した粒子に対しては, brownian 効力学計算を実行する. その粒子 i にはたらく力 \mathbf{F}_i は [LAMMPS のドキュメント](#) に則った形式だと以下のように書き表せる.

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

それぞれの力の説明を記す.

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

1.2.1 温度制御

2d kinetic temperature

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

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

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

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

2 実験

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いく。

系の上下両端のポテンシャルエネルギー差 mgL_y と運動エネルギー差 $k_B\Delta T$ の比を χ として以下のように設定する。

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

壁ポテンシャルまわりの無次元パラメータを 3 つ用意する。

R_d : 乾き具合.

R_t : 壁の厚み.

R_a : 濡れ具合.

これらを用いて、壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルは以下のように書き表す。

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

パラメータ (R_d, R_t, R_a) を変えることによって、壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルが変わる。このときに、どのようにして粒子集団の様相が変化するかを見る。

R_a と R_t を少しづ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い。以下に示すのが、それらを動かす範囲である。

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

$$R_t : 0.0 \sim 0.5$$

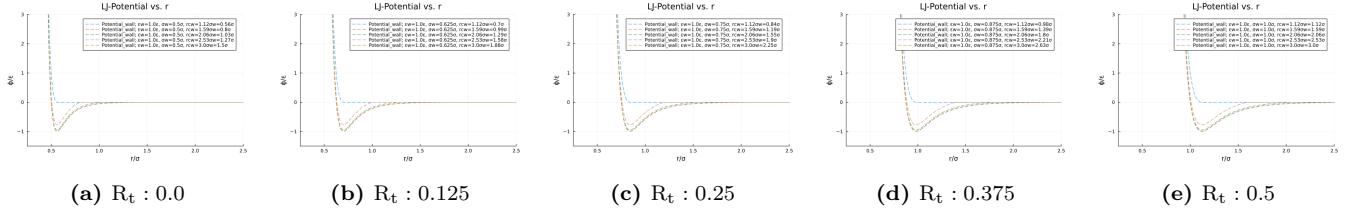


図 3: LJpotential

本章の以降の実験は特記がない限り以下のパラメータに近い値で行うものとする。

- $N = 1250$: 粒子数
- $\rho\sigma^2 = 0.4$: 粒子数密度
- $L_x/\sigma = 39.528471 \simeq 39.5$: 系の x 幅
- $L_y/\sigma = 79.0569414 \simeq 79.0$: 系の y 幅
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$: 初期温度
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$: 热浴の温度差
- $m g \sigma / \varepsilon = 0.0003999718779659611 \simeq 4.0 \times 10^{-4}$: 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。これ以後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。

いずれの実験の場合も $t \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0$ の時点では粒子は以下の画像のように、系に規則正しく並べられているとする。

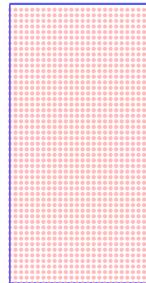


図 4: $N = 1250$

2.1 追実験

壁を完全に濡らしている状態を考えたいので, $r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0\sigma$ に設定する.

また, 重力をかけた状態で粒子が下に落ちきり, 緩和しているとみなせるまでシミュレーションを行ってから, 熱流をかけている. この時点でのシミュレーションではデータを解析することはない.

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



図 5: $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$ でのスナップショット

続いて重力をかけた緩和後の系で、熱浴の温度差を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している。このシミュレーションでデータを解析する。

- $\chi = k_B \Delta T / mgL_y = 1.265$
- $k_B \Delta T / \varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 1.0 \times 10^6$

$(R_d = 0.0, R_t = 0.5, R_a = 3.0 - 2^{1/6})$ で実験を行う。これは、 $(\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon, \sigma^{\text{wall}} = \sigma, r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0\sigma^{\text{wall}})$ に対応しているので、 $\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}} = \phi_{\text{LJ}}$ ということになり、先行研究と同じ結果を得ることができる。

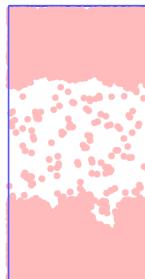


図 6: Ay100_rho0.4_T0.43_dt0.04_Rd0.0_Rt0.5_Ra1.877538_g0.0004_run1.0e8

2.2 重力と熱流を同時にかける

以下のように, R_a と R_t を少しづつ変えた系を設定して, それぞれシミュレーションをした.

	$R_a : 0.0$	$R_a : 0.469$	$R_a : 0.938$	$R_a : 1.408$	$R_a : 1.877$
$R_t : 0.0$	a	b	c	d	e
$R_t : 0.125$	f	g	h	i	j
$R_t : 0.25$	k	l	m	n	o
$R_t : 0.375$	p	q	r	s	t
$R_t : 0.5$	u	v	w	x	y

パラメータを確認する.

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

この際の粒子集団の様相は以下のようになる.



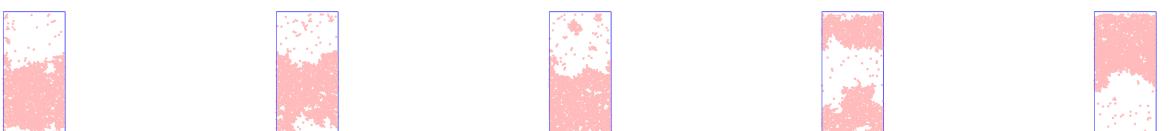
(a) $R_a = 0.0, R_t = 0.0$ (b) $R_a = 0.469, R_t = 0.0$ (c) $R_a = 0.938, R_t = 0.0$ (d) $R_a = 1.408, R_t = 0.0$ (e) $R_a = 1.877, R_t = 0.0$



(f) $R_a = 0.0, R_t = 0.125$ (g) $R_a = 0.469, R_t = 0.125$ (h) $R_a = 0.938, R_t = 0.125$ (i) $R_a = 1.408, R_t = 0.125$ (j) $R_a = 1.877, R_t = 0.125$



(k) $R_a = 0.0, R_t = 0.250$ (l) $R_a = 0.469, R_t = 0.250$ (m) $R_a = 0.938, R_t = 0.250$ (n) $R_a = 1.408, R_t = 0.250$ (o) $R_a = 1.877, R_t = 0.250$



(p) $R_a = 0.0, R_t = 0.375$ (q) $R_a = 0.469, R_t = 0.375$ (r) $R_a = 0.938, R_t = 0.375$ (s) $R_a = 1.408, R_t = 0.375$ (t) $R_a = 1.877, R_t = 0.375$



(u) $R_a = 0.0, R_t = 0.500$ (v) $R_a = 0.469, R_t = 0.500$ (w) $R_a = 0.938, R_t = 0.500$ (x) $R_a = 1.408, R_t = 0.500$ (y) $R_a = 1.877, R_t = 0.500$

図 7: リンク先の動画は $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに表示. スナップショットは $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = t_f\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2}$ 時.

重心位置 Y_g を系の y 幅でスケーリングして、時系列プロットすると、

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

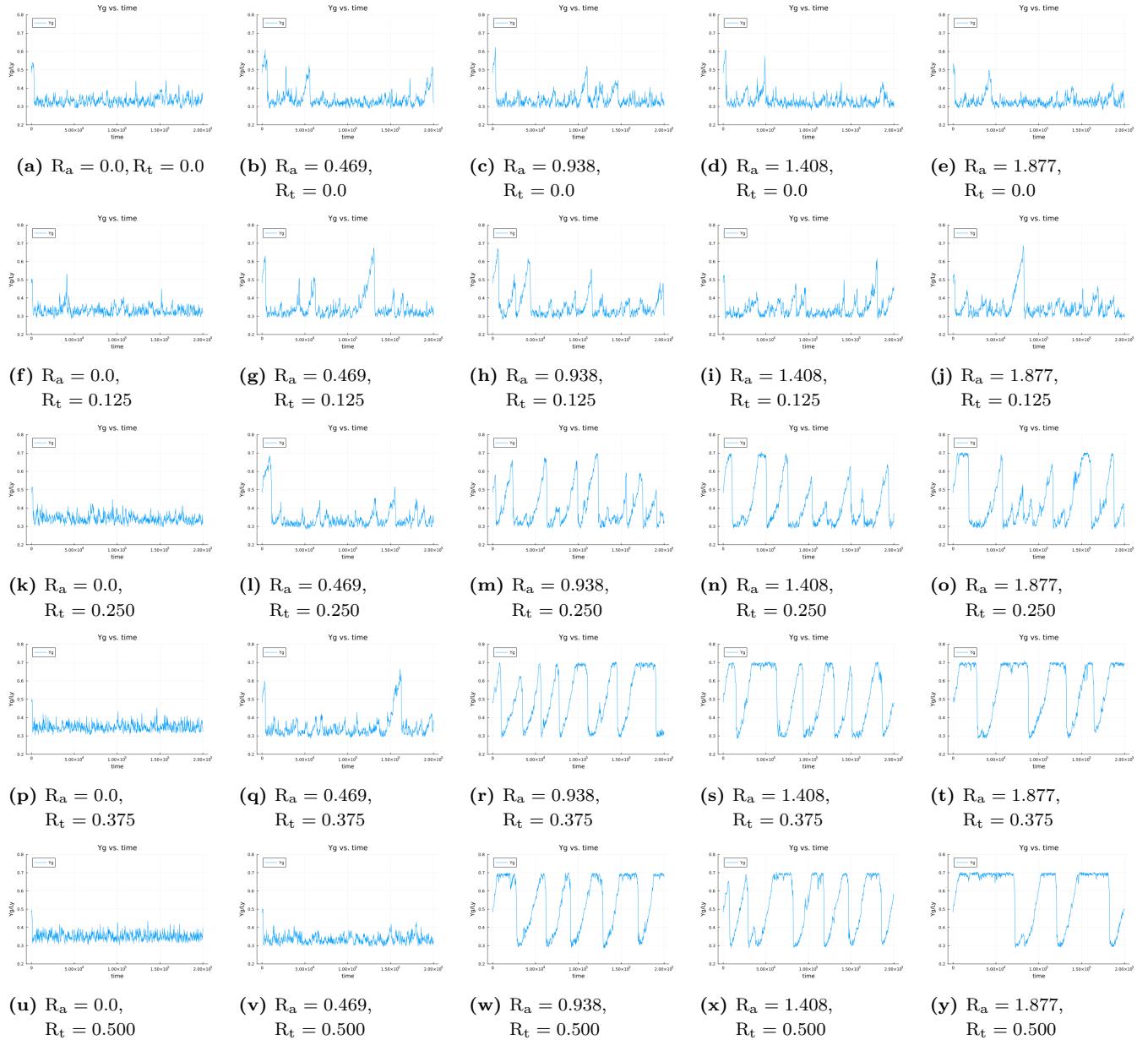


図 8: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.3 重力を先にかけて、熱流を後からかける

以下は、追実験のときと同じように、まず重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかけると同時に測定を開始するものである。

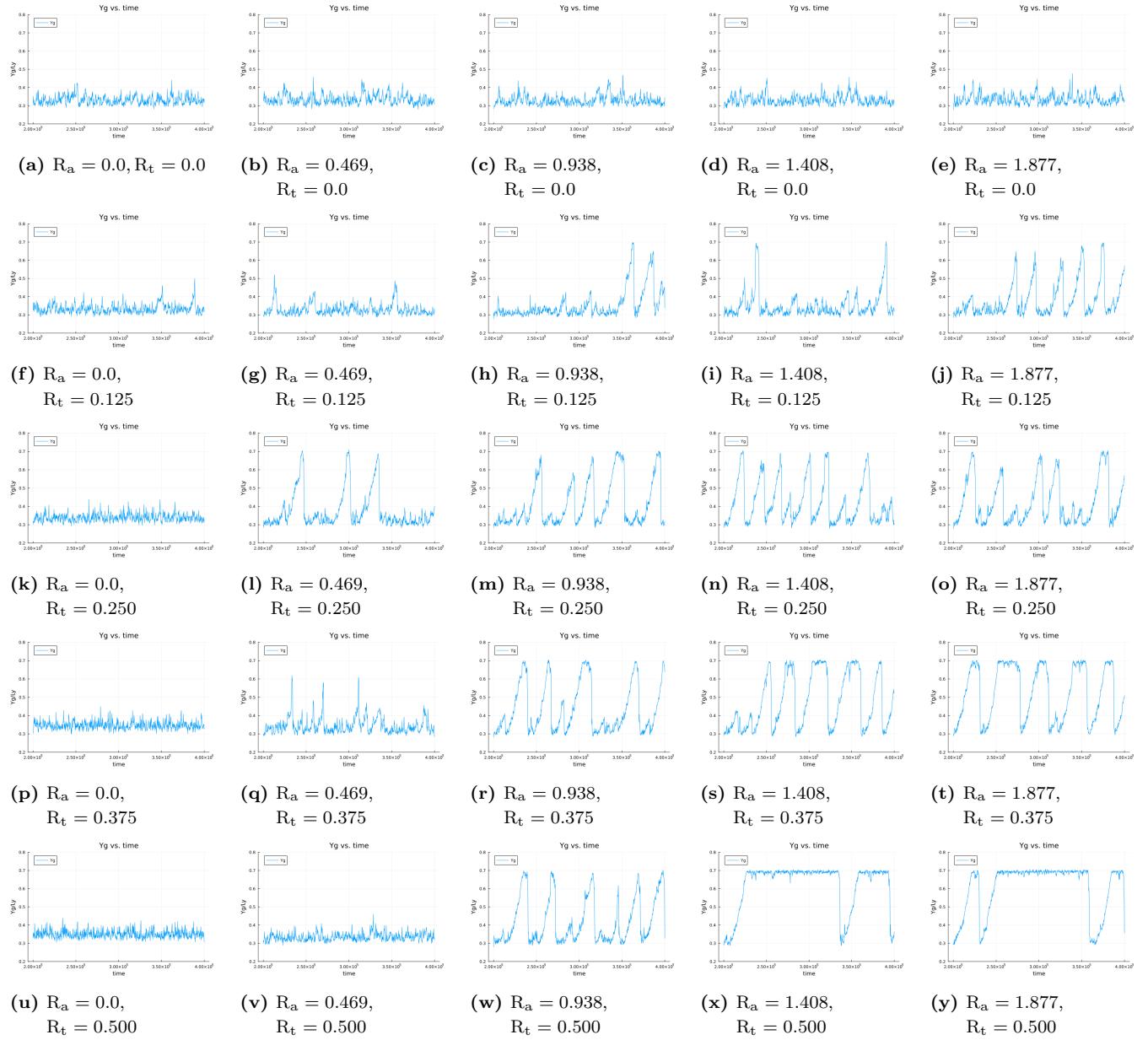


図 9: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.4 重力のみをかける

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

2.5 热流のみをかける

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 39.5\dots$
- $L_y/\sigma = 79.0\dots$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon = 0.0$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

3 分析

この章では、[2章](#)において行ったシミュレーションに対して、それぞれ分析をしていく。

3.1 R_a, R_t マップ

ここで、重心の標準偏差は以下のように書くことができる。

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

重心位置の標準偏差について同時プロットで表してみる。以降の解析は図 [8a](#) から定常状態にあるとみなせる、 $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.5 \times 10^4$ からのデータを用いてプロットすることにしている。

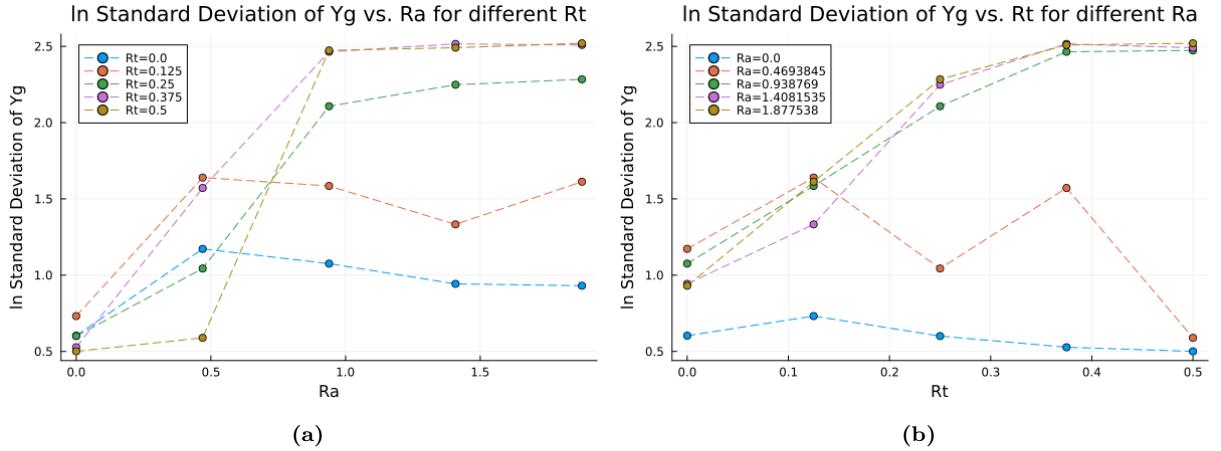


図 10: $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.5 \times 10^4$

3.2 周期性

重心位置が周期的に変化しているのかを調べたい。

図 8v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 8w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間をもっと詳しく見る。

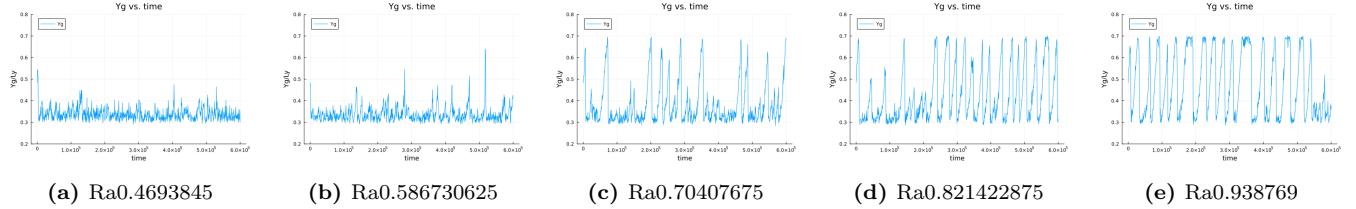


図 11: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^5, t \sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 600$ ごとにプロット。

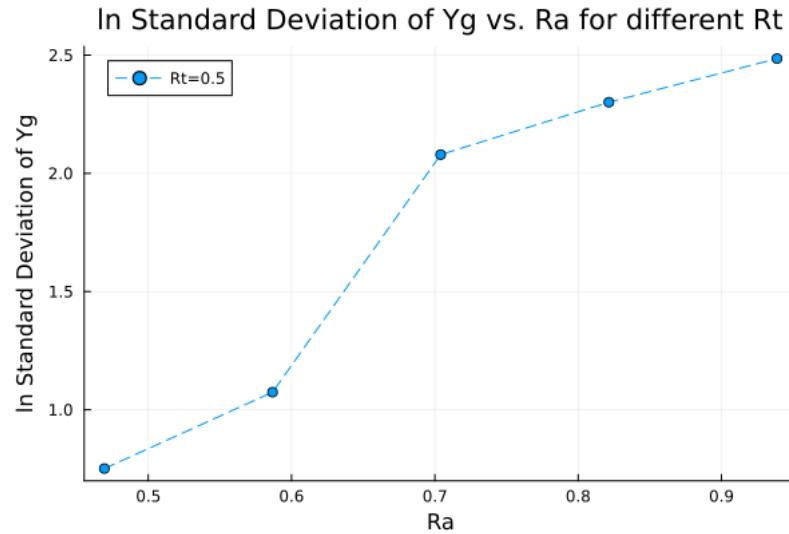


図 12

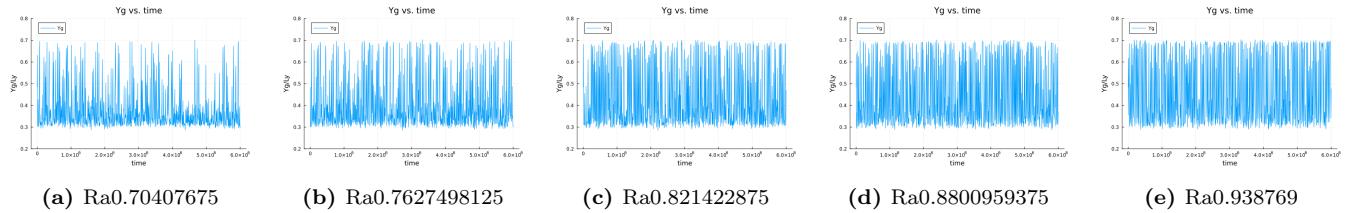


図 13: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 6000$ ごとにプロット.

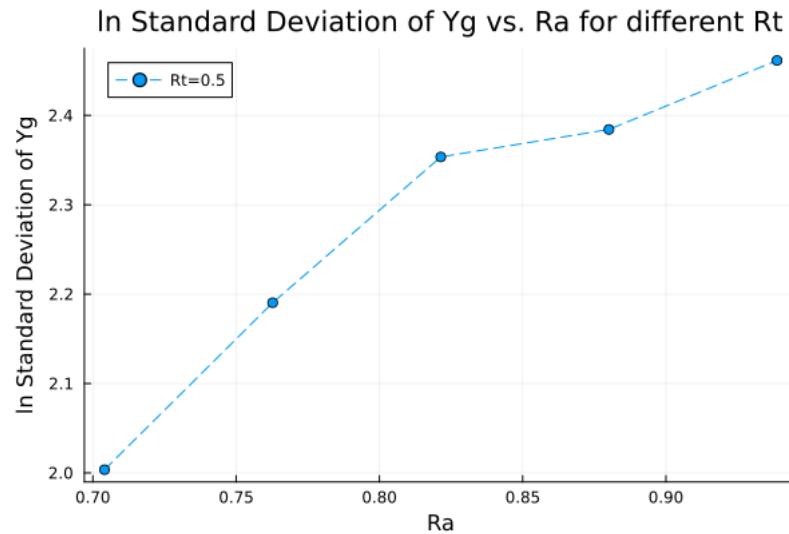


図 14

図 8v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 8w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間をもっと詳しく見る. その際, 簡単のため,

$Ra = 0.5 \sim 1.0$ の間を見るこにする.

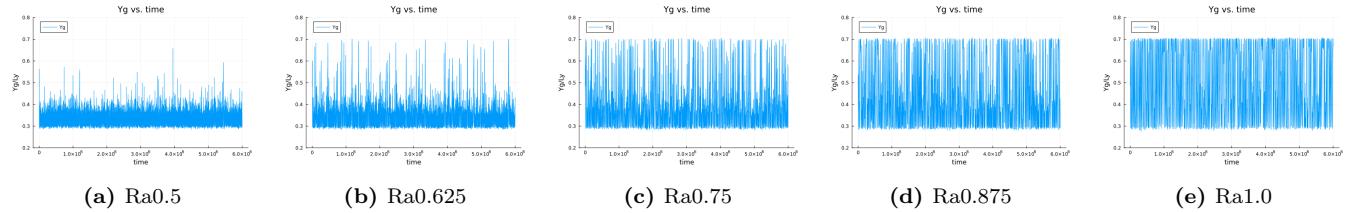


図 15: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 50$ ごとにプロット.

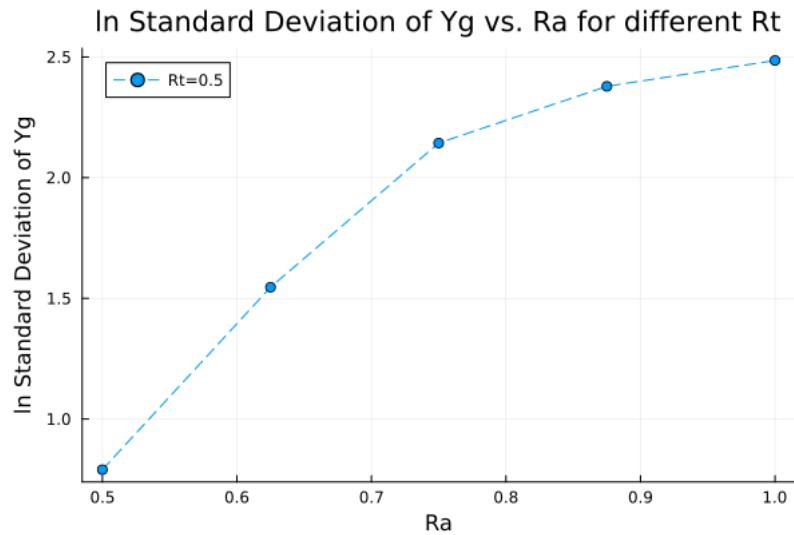


図 16

3.3 サイクル

図 8 の結果をそれぞれ正規化したヒストグラムにして表す.



図 17: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに Y_g をプロットしたもののヒストグラム. ピン数は共通で 50 本.

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.

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

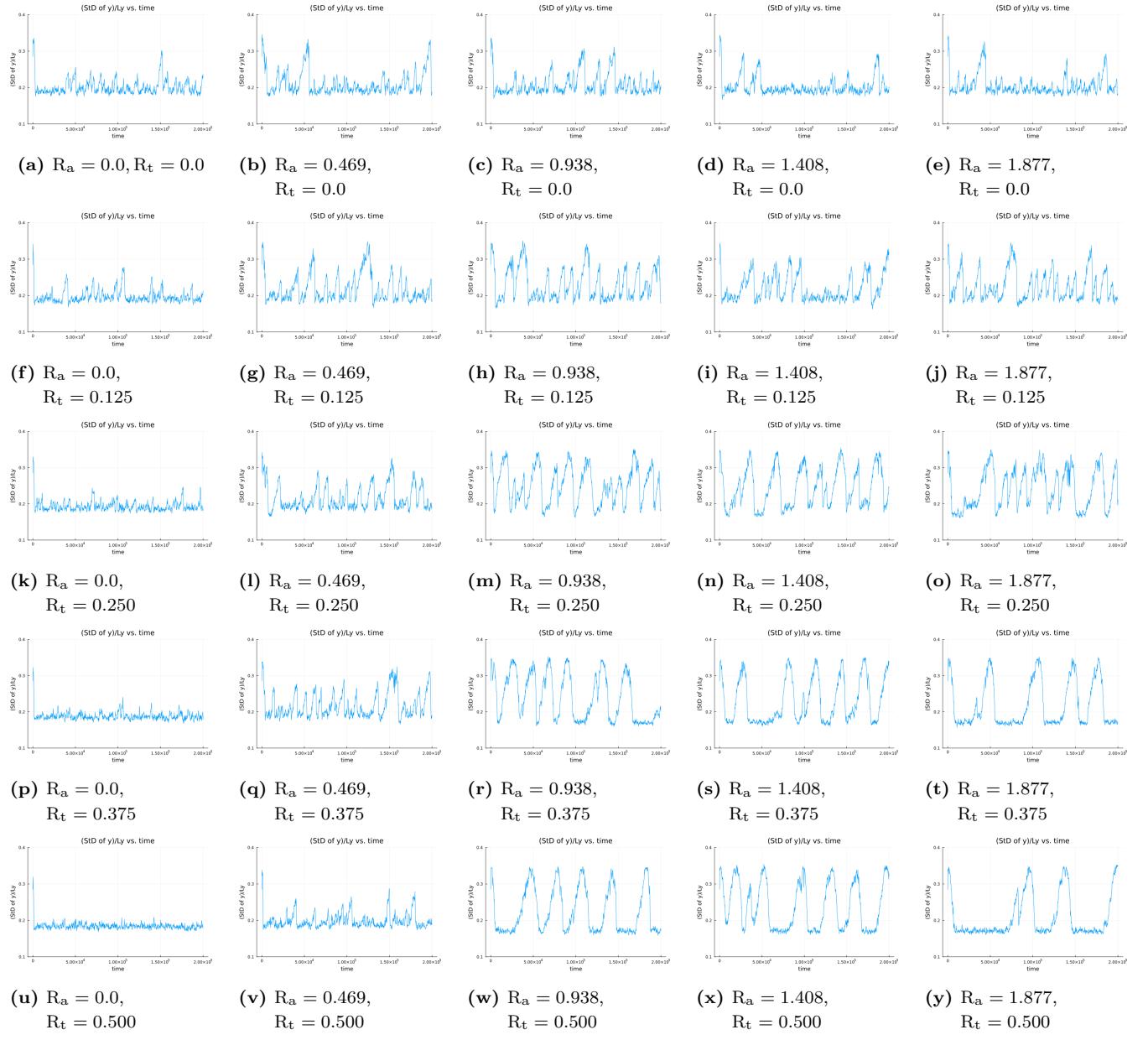


図 18: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット .

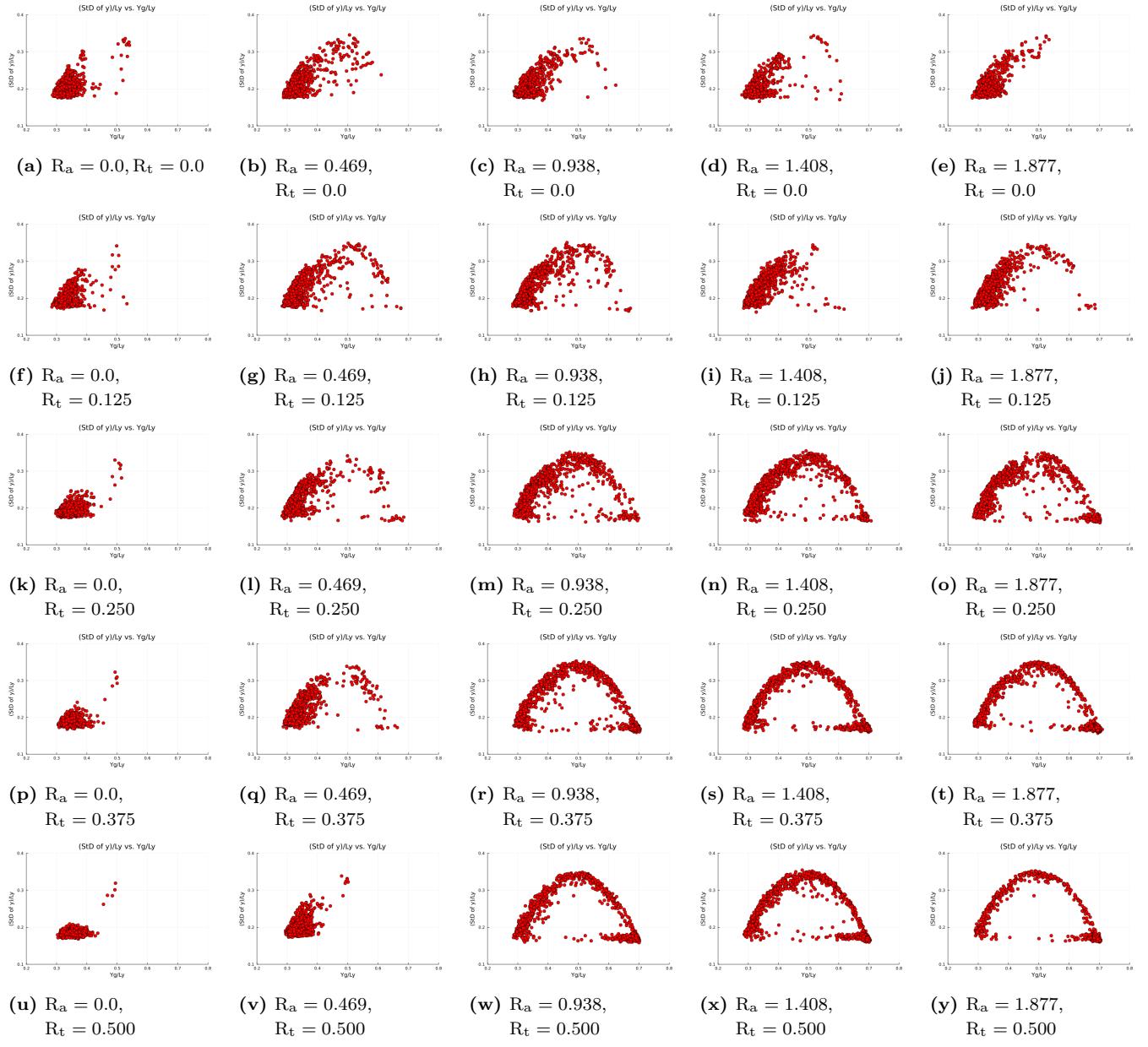


図 19: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.



図 20: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

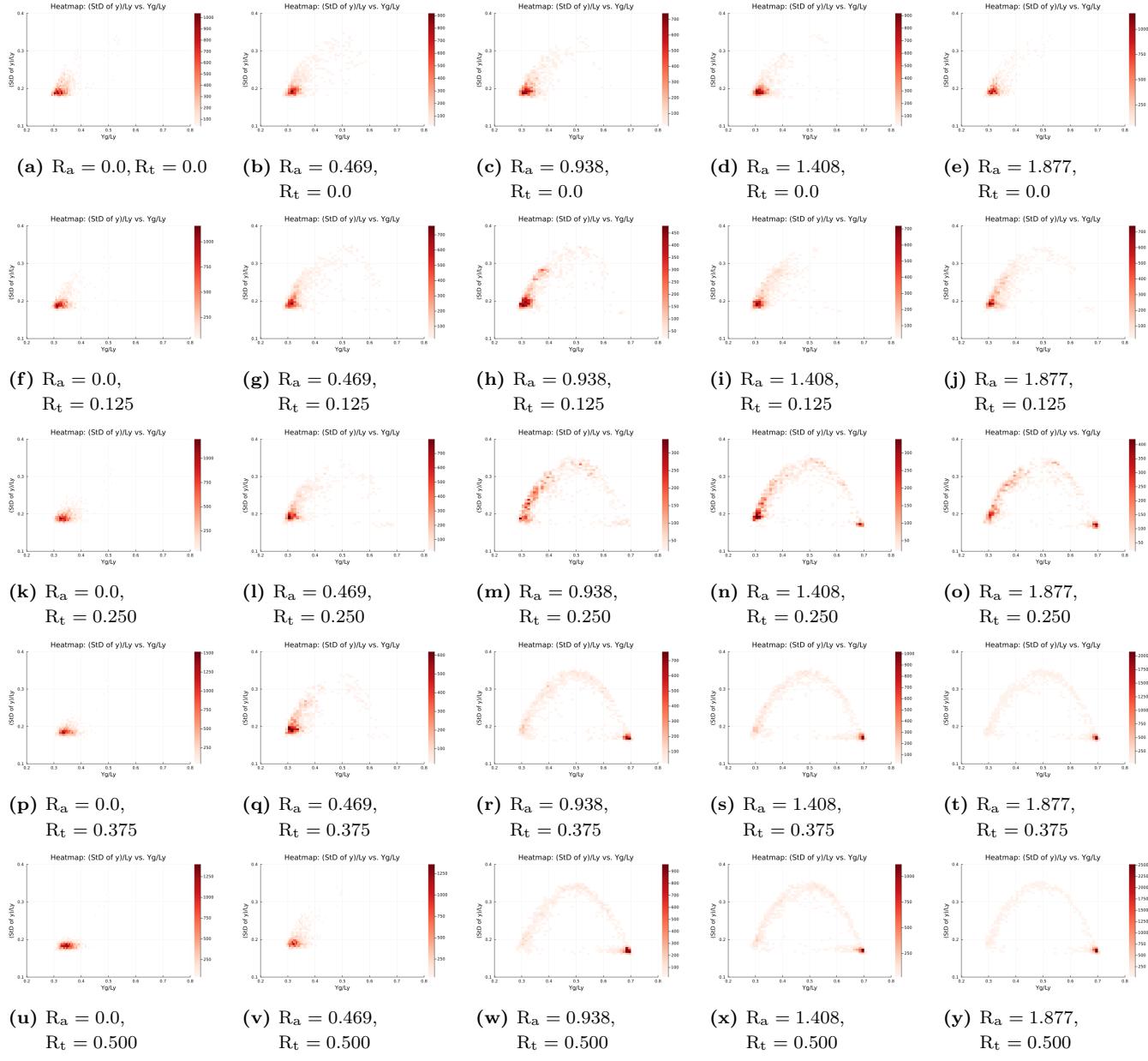


図 21: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.



図 22: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

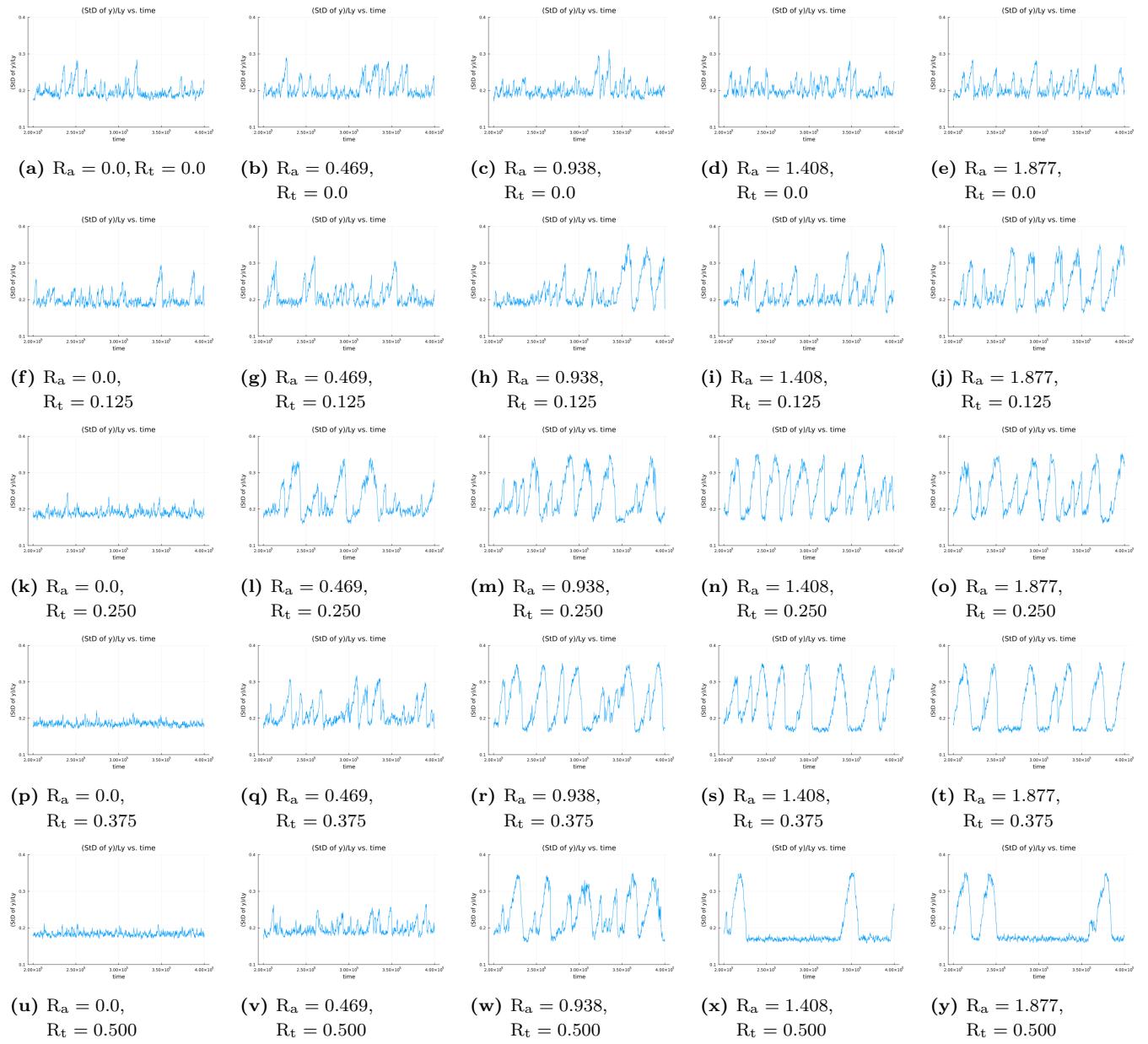


図 23: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット.

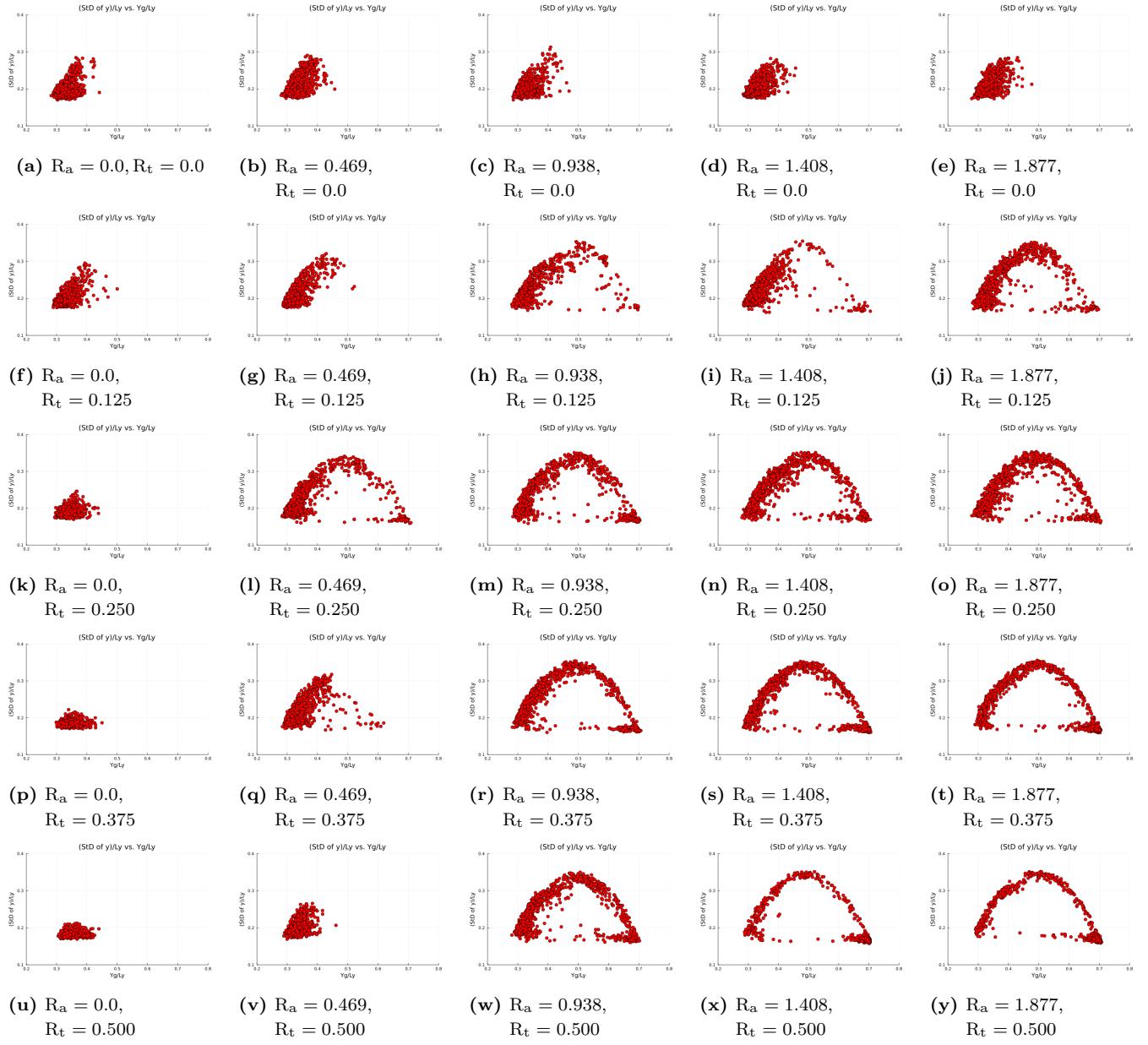


図 24: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

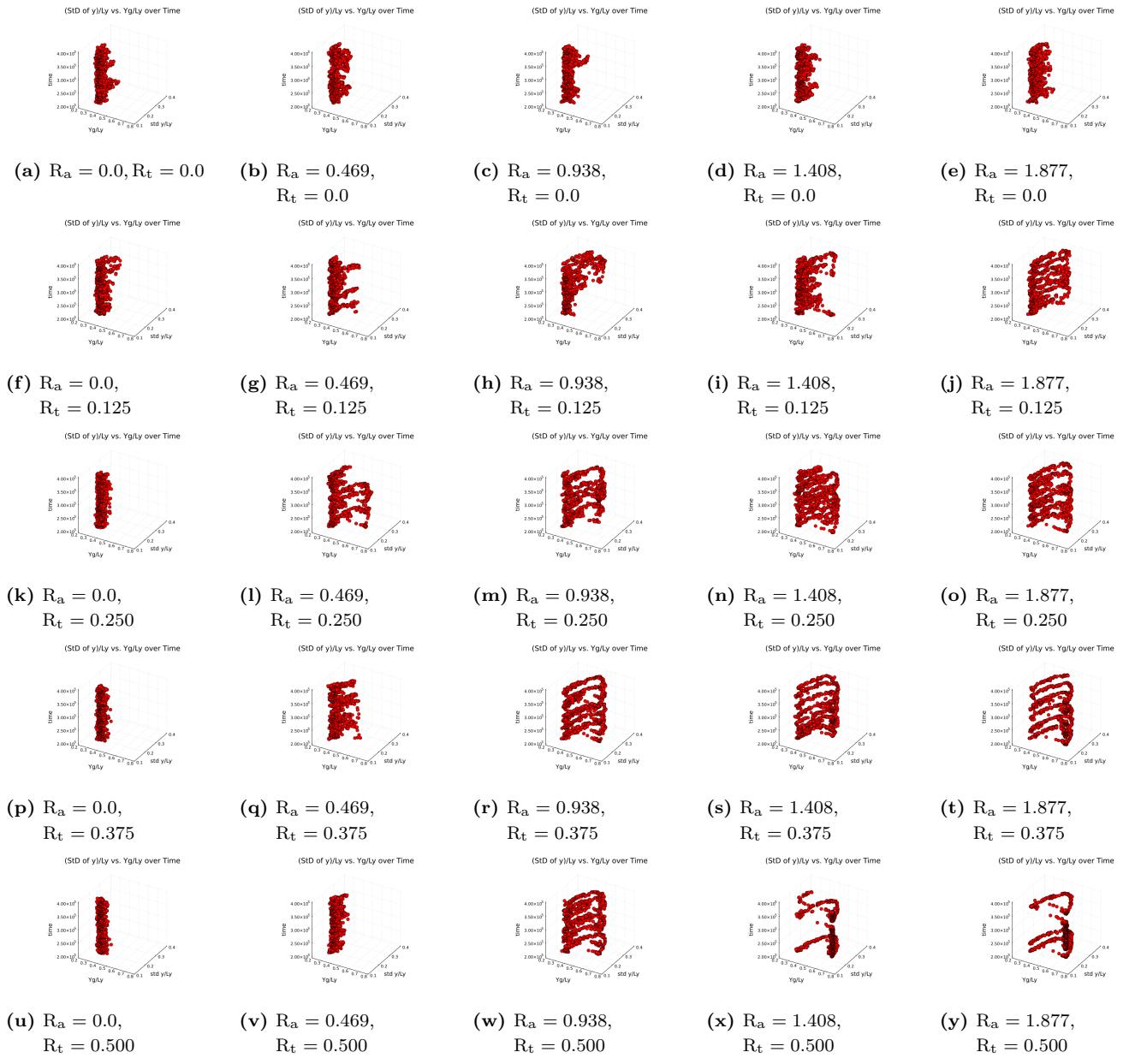


図 25: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

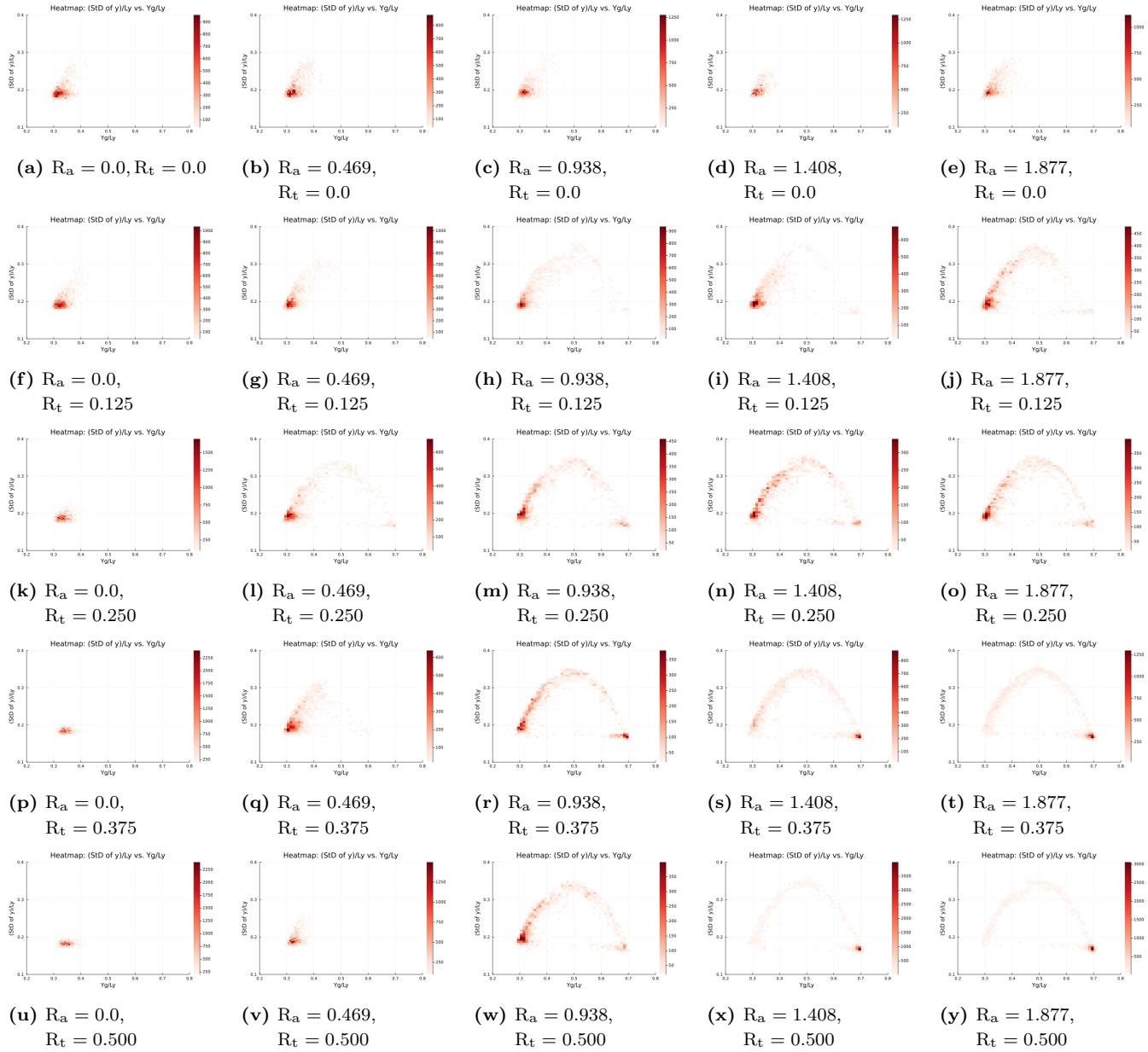


図 26: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

付録 A ソースコード

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

```

```

50 # variable coldhi equal -${gap}+${trange}
51 # variable hotlo equal ${Ay}-${gap}-${trange}
52 # variable hothi equal ${Ay}-${gap}
53
54
55 # 系の設定
56 units lj # LJ 単位系.
57 atom_style atomic # 粒子.
58 dimension 2 # 次元.
59 timestep 0.005 # MD シミュレーションの timestep.
60 boundary p f p # x=l,y=m,z=n の直線が周期境界条件.
61 lattice sq ${rho} # 粒子の初期配置. sq; 正方形セルの左隅に 1つ置く.
62 region box block ${box_xlo} ${box_xhi} ${box_ylo} ${box_yhi} -0.1 0.1 # 系の領域
    設定.
63 region catom block 0 ${Ax} 0 ${Ay} -0.1 0.1 # 粒子生成の領域設定.
64 create_box 1 box # 系の生成.
65 create_atoms 1 region catom # 粒子の生成.
66 mass 1 1.0 # 粒子の設定.
67 velocity all create ${T} ${SEED} dist gaussian # 粒子に温度
    t を目標とする初期速度をガウス分布に従って与える.
68
69 # 縦長のとき
70 region cold block INF INF ${coldlo} ${coldhi} -0.1 0.1 # 热浴C の領域.
71 region hot block INF INF ${hotlo} ${hothi} -0.1 0.1 # 热浴H の領域.
72 # # 横長のとき
73 # region cold block ${coldlo} ${coldhi} INF INF -0.1 0.1 # 冷たい热浴の領域.
74 # region hot block ${hotlo} ${hothi} INF INF -0.1 0.1 # 暖かい热浴の領域.
75
76 # 各热浴領域の温度を計算
77 compute Tcold all temp/region cold # c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.
78 compute Thot all temp/region hot # c_Tcold で cold 热浴領域の温度を取得.
79
80 # 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル
81 pair_style lj/cut ${rc_pair}
82 pair_coeff 1 1 ${epsilon_pair} ${sigma_pair} ${rc_pair}
83 pair_modify shift yes # ポテンシャルエネルギーが 0 になる距離がカットオフ長になるように全
    体的にシフトアップする.
84
85 # 高速化コマンド. neighbor list に入れる距離指定.
86 neighbor 0.3 bin
87 neigh_modify every 1 delay 0 check yes
88
89 # システムに他の操作がない場合にnve アンサンブルに一致するだけで、今回の系はlangevin 热浴
    を用いた nvt アンサンブルであることに注意.
90 fix 1 all nve
91

```

```

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

```

```

130 dump_modify 2 pad 3
131
132 # YAML
133 fix extra all print ${thermo} """
134 -timestep:$step
135 temp:$temp
136 pe:$pe
137 TotE:$etotal
138 xg:$c_CoM[2]
139 Tcold:$c_Tcold
140 Thot:$c_Thot"""
141 file output.yaml screen no
142
143 # log
144 thermo_style custom step temp pe etotal c_CoM[2] c_Tcold c_Thot # 出力する物理量.
145
146 # 一次元プロファイル(今は温度と密度だけ計算と出力)
147 compute chunk all chunk/atom bin/1d y lower 3.0 units box
148 fix tempp all ave/chunk 100000 1 100000 chunk temp file temp_profile.profile
149 fix rhop all ave/chunk 100000 1 100000 chunk density/number file rho_profile.
150 profile
151
152 thermo ${thermo} # 热力学量の出力.
153 thermo_modify norm no # 示量的な热力学量に调整.
154
155 run ${run} # 実行.

```

ソースコード 2: lammps_modexe.jl

```

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

```

```

17 #=
18 パラメータを指定.
19 各パラメータの要素数の積数回分だけlammpsが実行されるので大きくしそうないように注意.
20 =
21 Ay_range = range(50,length=1) # 偶数にする.
22 rho_range = range(0.4,length=1) # 密度.
23 T_range = range(0.43,length=1) # 初期温度.
24 dT_range = range(0.04,length=1) # 热浴の温度の差.
25 g_range = range(4e-4,length=1) # 重力.
26 # rt_range = range(0.0,length=1) # 壁の厚み.
27 # ra_range = range(3.0-1.122462,length=1) # 濡れ具合.
28 run_range= range(1e7,length=1) # run step.

29
30 # 多重ループを用いてパラメータごとに実験を実行.
31 for Ay in Ay_range,
32     rho in rho_range,
33     T in T_range,
34     dT in dT_range,
35     g in g_range,
36     # rt in rt_range,
37     # ra in ra_range,
38     run_value in run_range # 変数をrunにしてしまうと julia の run('') と競合してしまう.
39
40 template_script = read(lammpsfile, String) # lammps ファイルを読み込む.
41 # パラメータ編集.
42 mod_script = replace(template_script,
43 "PLACEHOLDER_Ay" => string(Ay),
44 "PLACEHOLDER_rho" => string(rho),
45 "PLACEHOLDER_T" => string(T),
46 "PLACEHOLDER_dT" => string(dT),
47 "PLACEHOLDER_g" => string(g),
48 # "PLACEHOLDER_rt" => string(rt),
49 # "PLACEHOLDER_ra" => string(ra),
50 "PLACEHOLDER_run" => string(run_value)
51 )
52
53 tempfile = "in.temp_script" # 仮lammps ファイル.
54 fp = open(tempfile, "w") # 仮ファイルを作成して開く.
55 write(fp, mod_script) # 仮ファイルにパラメータを書き込む.
56 close(fp)
57
58 n = string(now()) # 実験日時の記録.
59 parameter = "Ay$(Ay)_rho$(rho)_T$(T)_dT$(dT)_g$(g)_run$(run_value)"
60 run(`mpirun -n 4 lmp_mpi -log output.log -in $(tempfile)` ) # lammps の実行.
61 run(`rm $(tempfile)` ) # 仮ファイルを削除.
62

```

```

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

```

ソースコード 3: plot_LJpotential.jl

```

1 # 汎用LJ ポテンシャル描画セル.
2 # パッケージ.
3 using Plots
4
5 # 関数定義.
6 function theta(r) # 階段関数.
7     return r > 0 ? 1 : 0
8 end

```

```

9 function phi(epsilon, sigma, r) # LJ ポテンシャル.
10    return 4.0 * epsilon * ((sigma/r)^12 - (sigma/r)^6)
11 end
12 function phi_tilde(r, epsilon, sigma, rc) # シフトアップとカットオフ.
13    return (phi(epsilon, sigma, r) - phi(epsilon, sigma, rc)) * theta(rc - r)
14 end
15
16 # 粒子-粒子LJ ポтенシャルのパラメータ.
17 epsilon = 1.0
18 sigma = 1.0
19 rc = 3.0 * sigma
20
21 # Rd, Rt, Ra の配列.
22 Rd_values = range(0.0, length=1)
23 Rt_values = range(0.0, 0.5, length=5)
24 Ra_values = range(1.877, length=1)
25
26 # プロット概形.
27 plot(xlabel="r/σ", ylabel="^cf^95/ε")
28 xlims!(0.2, 2.5)
29 ylims!(-1.5, 3.0)
30 title!("LJ-Potential_vs_r")
31 xlabel!("r/σ")
32 ylabel!("^cf^95/ε")
33
34 # 粒子-粒子LJ ポтенシャルのプロット.
35 plot!(r -> phi_tilde(r, epsilon, sigma, rc), label="Potential_pair; ε=$(round(
36     epsilon, digits=1)), σ=$(round(sigma, digits=1)), rc=$(round(3.0, digits=2)) σ",
37     linestyle=:dash)
38
39 # プロットの追加.
40 for Rd in Rd_values,
41     Rt in Rt_values,
42     Ra in Ra_values
43     # 壁-粒子LJ ポтенシャルのパラメータ.
44     epsilon_wall = (1.0 - Rd) * epsilon
45     sigma_wall = (0.5 + Rt) * sigma
46     rc_wall = ((2^(1/6)) + Ra) * sigma_wall
47     # 打つ点を調整.
48     x_values = range(Rt+0.3, 3.0, length=10000)
49     y_values = phi_tilde.(x_values, epsilon_wall, sigma_wall, rc_wall)
50     # 壁-粒子LJ ポтенシャルのプロット.
51     plot!(x_values, y_values, label="Potential_wall; ε w=$(round(epsilon_wall,
52         digits=1)) ε , σ w=$(round(sigma_wall, digits=1)) σ , rc w=$(round((2^(1/6)),
53         + Ra, digits=2)) σ w=$(round(((2^(1/6)) + Ra)*sigma_wall, digits=2)) σ",
54         linestyle=:dash)

```

```
50 end
51
52 display(plot!())
53 # savefig("")
54
55 ccall(:jl_tty_set_mode, Int32, (Ptr{Cvoid}, Int32), stdin.handle, true)
56 read(stdin, 1)
```

参考文献

- [1] 渡邊孝信. 分子動力学法と原子間ポテンシャル. 森北出版, 2023.