

”平均力 Couette 流モデル” の数式解説 (”in.flow.ave”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本入力ファイルは LIGGGHTS 離散要素法で面平均力制御流を模擬し、上下壁に平均力を与えて内向き圧縮を実現する粒子群を駆動する。粒子間ポテンシャルは

$$U_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

であり、切断距離 $r_c = 1.12246\sigma$ によって有限化される。

$$\mathbf{F}_{\text{upper}} = (0, -3, 0), \quad \mathbf{F}_{\text{lower}} = (0, 3, 0). \quad (2)$$

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \xi (T_0 - T(t)). \quad (3)$$

時間積分は

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{F}_i(t) \quad (4)$$

で行い、粘性応力は

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{V} \sum_{i < j} \frac{x_{ij} y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \quad (5)$$

として評価する。壁面平均力が時間一様に作用し、流体内部の応力緩和と層状構造の安定性を測定できる。