

”冷壁 Couette 流モデル” の数式解説 (“in.flow.cold”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本入力ファイルは LIGGGHTS 離散要素法で冷壁 Couette 流を模擬し、壁粒子を冷却状態に保ったまま平行移動させることで層流せん断を誘起する粒子群を駆動する。粒子間ポテンシャルは

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

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

$$u_x(y, 0) = \frac{u_{\text{top}} - u_{\text{bot}}}{h} (y - y_{\text{bot}}) + u_{\text{bot}}. \quad (2)$$

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

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。上壁速度 $u_{\text{top}} = 5$ と下壁 $u_{\text{bot}} = 0$ が線形速度勾配を形成し、冷壁 Couette 流が維持される。