”HooverDrag 流モデル” の数式解説（”in.flow.hoover”）

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本入力ファイルは LIGGGHTS 離散要素法で Hoover/Drag Couette 流を模擬し,Hoover/Drag フィードバックで流体温度を制御する粒子群を駆動する。粒子間ポテンシャルは

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

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

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

$$\dot{\zeta} = \frac{1}{Q}\left(\frac{2K}{f k_{\mathrm{B}}} - T_0\right). \tag{3}$$

$$\dot{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - (\zeta + \gamma)\mathbf{v}_i. \tag{4}$$

時間積分は

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t\,\mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i}\mathbf{F}_i(t) \tag{5}$$

で行い、粘性応力は

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{V}\sum_{i<j}\frac{x_{ij}y_{ij}}{r_{ij}}\frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \tag{6}$$

として評価する。粘性散逸とドラッグ係数の釣り合いにより、定常温度場の成立と運動量緩和を同時に解析できる。