

”LJ Newton 無効モデル” の数式解説 (“in.lj.newton”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本入力ファイルは LIGGGHTS 離散要素法による多種 Lennard-Jones 流体を設定し,NPT (Newton 無効) を実行する。混合ポテンシャルは

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

であり、ミキシング則

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \sqrt{\varepsilon_{\alpha}\varepsilon_{\beta}}, \quad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}}{2} \quad (2)$$

を適用する。運動量保存は

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}(t) + \sum_i \mathbf{F}_i \Delta t \quad (3)$$

で更新される。

$$\dot{\zeta} = \frac{1}{Q_T} \left(\frac{2K}{fk_{\text{B}}} - T_0 \right), \quad \dot{\eta} = \frac{1}{Q_P} (P - P_0). \quad (4)$$

$$\eta_{\text{pair}} = 0 \quad (5)$$

Newton 交換を無効にした場合の速度と圧力の一致性をベンチマークできる。