

# 圧力テンソルの数式解説 (compute\_pressure.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

分子系あるいは粒子系の圧力は、各粒子の運動量流束と粒子間相互作用が作る**マイクロ応力**を体積平均することで得られる。本ファイルで実装されている `ComputePressure` は、離散要素法における圧力テンソル

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{\text{kin}} + \mathbf{P}^{\text{vir}} \quad (1)$$

を計算し、その跡（一階不変量）を空間次元で除したスカラー圧力

$$p = \frac{1}{d} \text{tr}(\mathbf{P}) \quad (2)$$

を出力する。ここで  $d \in \{2, 3\}$  は計算空間の次元である。以下では各項の導出を説明する。

■**運動論的寄与** 粒子  $i$  の質量を  $m_i$ 、速度を  $\mathbf{v}_i$  とすると、運動論的応力テンソルは

$$P_{\alpha\beta}^{\text{kin}} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} \quad (3)$$

で与えられる。跡を取ると理想気体の式に一致し、

$$\text{tr}(\mathbf{P}^{\text{kin}}) = \frac{2K}{V} = \frac{N_{\text{dof}} k_B T}{V}, \quad (4)$$

となる。ここで  $K = \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2$  は系の総運動エネルギー、 $N_{\text{dof}}$  は自由度、 $k_B$  はボルツマン定数である。コードでは温度コンピュートにより  $T$  が得られ、式 (??) が計算に利用される。

■**ビリアル (相互作用) 寄与** 粒子間相互作用あるいは拘束 (ボンド、角度、ジヘドラル、インプロパー)、外部ポテンシャル、さらに長距離クーロンや KSpace などの寄与はすべて**ビリアル**にまとめられる。一般に

$$\mathbf{P}^{\text{vir}} = -\frac{1}{V} \sum_{i<j} \mathbf{r}_{ij} \otimes \mathbf{f}_{ij}, \quad (5)$$

ただし  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ 、 $\mathbf{f}_{ij}$  は粒子  $j$  が  $i$  に及ぼす力である。LAMMPS/LIGGGHTS では各力モジュールが 6 成分 ( $xx, yy, zz, xy, xz, yz$ ) のビリアルを保持し、`ComputePressure` がそれらを集約する。

■**全圧力テンソルとスカラー圧力** 式 (??) と (??) を合わせると

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[ \sum_i m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} - \sum_{i<j} r_{ij\alpha} f_{ij\beta} \right]. \quad (6)$$

体積  $V$  は 3 次元なら  $L_x L_y L_z$ 、2 次元なら  $L_x L_y$  として

$$V = \begin{cases} L_x L_y L_z, & d = 3, \\ L_x L_y, & d = 2. \end{cases} \quad (7)$$

したがってスカラー圧力は

$$p = \frac{1}{dV} \left[ N_{\text{dof}} k_B T - \sum_{i < j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}_{ij} \right]. \quad (8)$$

コード中ではエネルギー単位を圧力単位に変換する係数

$$nktv2p = \frac{1}{V} \frac{1}{d} \quad (9)$$

(単位系依存) を用い, 式 (??) を

$$p = nktv2p \left( N_{\text{dof}} k_B T + \sum_{\alpha=1}^d \text{virial}_{\alpha} \right) \quad (10)$$

の形で評価している.  $\text{virial}_{\alpha}$  は  $xx, yy, zz$  成分を指し, 2次元では  $zz$  成分を棄却する実装である.

■長距離補正と外部拘束 長距離レナード=ジョーンズ補正が有効な場合, 体積当たりの尾部修正

$$\mathbf{P}^{\text{tail}} = \frac{U_{\text{tail}}}{V} \mathbf{I} \quad (11)$$

が追加され, ビリアル対角成分に加算される. またクーロン長距離 (KSpace) ビリアルは別途全プロセスで集約済みの値を加える設計である.

■テンソル出力 必要に応じて圧力テンソル  $\mathbf{P}$  の全 6 成分を

$$P_{xx}, P_{yy}, P_{zz}, P_{xy}, P_{xz}, P_{yz} \quad (12)$$

として出力できる. 2次元系では  $P_{zz} = P_{xz} = P_{yz} = 0$  と置き換え, 残り 3 成分のみを計算する.

■まとめ 以上より `compute_pressure.cpp` は, 運動エネルギーから温度を取得し式 (??) の理想気体項を構成, あらゆる力学モジュールのビリアルを式 (??) に従って合算し, 体積と次元を考慮してスカラー圧力 (??) およびテンソル圧力 (??) を返す. これにより DEM 系における統計力学的圧力のリアルタイム監視が可能となる.