

Temp/Deform モデルの数式解説 (compute_temp_deform.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

連続体力学の観点から、LAMMPS における compute_temp_deform は、変形を受けるシミュレーションセル内の「流れを差し引いた熱運動」に対応する運動エネルギーおよび温度を評価する。以下にその数式的定式化を示す。

まず、変形セルの形状は時間依存行列

$$\mathbf{H}(t) = \begin{bmatrix} h_{xx} & h_{xy} & h_{xz} \\ 0 & h_{yy} & h_{yz} \\ 0 & 0 & h_{zz} \end{bmatrix}$$

で表す(LAMMPS の内部表現では $h_{xy} = h_{yx}$ など上三角成分のみ保持する)。セル座標 $\boldsymbol{\lambda}_i = (\lambda_{i1}, \lambda_{i2}, \lambda_{i3})^T \in [0, 1]^3$ と物理座標 \mathbf{x}_i の対応は

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{H}(t) \boldsymbol{\lambda}_i, \quad (1)$$

で与えられる。セル行列の時間微分 $\dot{\mathbf{H}}(t) = \frac{d\mathbf{H}}{dt}$ は伸長・剪断速度を含み、domain->h_rate に相当する。また並進成分 $\dot{\mathbf{H}}_0(t)$ (domain->h_rate10) を考慮すると、スケール座標で静止している粒子が観測される流れ速度は

$$\mathbf{v}_i^{\text{stream}}(t) = \dot{\mathbf{H}}(t) \boldsymbol{\lambda}_i + \dot{\mathbf{H}}_0(t). \quad (2)$$

実粒子速度 \mathbf{v}_i から式 (2) を差し引くことで熱速度

$$\mathbf{v}_i^{\text{th}}(t) = \mathbf{v}_i(t) - \mathbf{v}_i^{\text{stream}}(t) \quad (3)$$

を得る。質量 m_i を持つ N 粒子系の総運動エネルギーは

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \|\mathbf{v}_i^{\text{th}}(t)\|^2, \quad (4)$$

であり、ここで $\|\cdot\|$ はユークリッドノルムである。

自由度 d_{of} を用いて温度を定義すると

$$T(t) = \frac{2K(t)}{d_{\text{of}} k_B}, \quad (5)$$

となる。compute_temp_deform における tfactor は

$$\text{tfactor} = \frac{m v v 2e}{d_{\text{of}} k_B}, \quad (6)$$

であり、mvv2e は「質量 × 速度²」をエネルギー単位に変換する係数である。式 (4) を mvv2e 倍して式 (5) に代入するとコード中の scalar = tfactor * t と一致する。

さらに, 温度テンソル (運動モーメント) を

$$\Theta(t) = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^{\text{th}}(t) \otimes \mathbf{v}_i^{\text{th}}(t) = \begin{bmatrix} \Theta_{xx} & \Theta_{xy} & \Theta_{xz} \\ \Theta_{yx} & \Theta_{yy} & \Theta_{yz} \\ \Theta_{zx} & \Theta_{zy} & \Theta_{zz} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

と定義する (\otimes は外積). 実装は上三角 (6 成分) を返し, 各成分は

$$\Theta_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^N m_i v_{i,\alpha}^{\text{th}} v_{i,\beta}^{\text{th}}, \quad (\alpha, \beta \in \{x, y, z\}), \quad (8)$$

である. コードでは `vector[0-5]` に $\{\Theta_{xx}, \Theta_{yy}, \Theta_{zz}, \Theta_{xy}, \Theta_{xz}, \Theta_{yz}\}$ を格納し, `force->mvv2e` を掛けてエネルギー密度単位に変換する.

以上より, `compute_temp_deform.cpp` はセル変形に伴う流速を厳密に差し引き, 粒子熱運動に基づく温度と運動モーメントを評価していることが確認できる.