シミュレーション実習 2022 年度期末レポート問題

名古屋大学大学院理学研究科　川﨑猛史　出題

2022 年 6 月 12 日

[注意事項] 以下の問題（第１問・第２問）を期限までに解き **NUCT** 課題の当該箇所から答案および数値計算に使用した任意のプログラミング言語を用いたコードを提出せよ．なお，答案は **pdf** ファイル，コードはテキストファイル **(**拡張子 **cpp** や **py)**，**python** ノートブック **(**拡張子**.ipynb)** などとせよ．

第１問（Langevin 熱浴中の１粒子ブラウン運動）

温度 T，摩擦係数が ζ である $\boxed{2\text{ 次元}}$ 溶媒中を熱揺動力による駆動される質量 m の 1 粒子運動を考える．なお，この粒子の運動は Langevin 方程式

$$m\dot{\mathbf{v}}(t) = -\zeta \mathbf{v}(t) + \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t)$$

によってモデル化できることが広く知られている．ここで，熱揺動力 $\mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t)$ は，揺動散逸定理

$$\left\langle \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t) \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t') \right\rangle = 4k_{\mathrm{B}}T\zeta\delta(t-t')$$

を満たす．以下，長さの単位を a, 時間の単位を t_0 とし，このモデルで駆動される粒子の質量を系統的に変化させた際，粒子運動がどの様に変化するかを考察しよう．
[設問]

(1) 分散 1 の正規乱数 $\mathbf{R}_{\mathrm{G}}$ を用いることで，熱揺動力は $\mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t) = \sqrt{\frac{2k_{\mathrm{B}}T\zeta}{\Delta t}}\mathbf{R}_{\mathrm{G}}$ と表されることを講義で扱った．無次元化に際しては，$\mathbf{v} = (a/t_0)\tilde{\mathbf{v}}$, $\mathbf{F}_{\mathrm{B}}(t) = \sqrt{\frac{2k_{\mathrm{B}}T\zeta}{t_0\Delta\tilde{t}}}\mathbf{R}_{\mathrm{G}}$ とする．いま，本モデルを特徴づける時間スケール $t_{\mathrm{D}} = \frac{\zeta}{m}$，$t_{\mathrm{B}} = \frac{a^2\zeta}{k_{\mathrm{B}}T}$ を導入することで，Langevin 方程式が

$$\frac{t_{\mathrm{D}}}{t_0}\dot{\tilde{\mathbf{v}}} = -\tilde{\mathbf{v}} + \sqrt{\frac{2t_0}{t_{\mathrm{B}}\Delta\tilde{t}}}\mathbf{R}_{\mathrm{G}}$$

と表されることを示せ.

(2) (1) で得られた無次元化された Langevin 方程式の時間の単位 t_0 を t_{B} と定めることで，当該方程式は

$$m^*\dot{\tilde{\mathbf{v}}} = -\tilde{\mathbf{v}} + \sqrt{\frac{2}{\Delta\tilde{t}}}\mathbf{R}_{\mathrm{G}}$$

と表される．この時，m^* は慣性質量の大きさに比例する量：$mk_{\mathrm{B}}T/\zeta^2a^2$ であることを示せ.（m^* は当該方程式のパラメータとなり，これを変化させることで粒子の慣性質量依存性を議論することができる.）

(3) 当該モデルにより駆動される粒子の平均二乗変位は，理論的に $\left\langle \Delta\mathbf{r}(t)^2 \right\rangle = \frac{4k_{\mathrm{B}}T}{\zeta}\{t + \frac{m}{\zeta}e^{-\zeta t/m} - \frac{m}{\zeta}\}$ と表されることを講義で扱った．これを (2) の様に長さの単位を a, 時間の単位を $t_0 = t_{\mathrm{B}}$ として無次元化することで，無次元化された平均二乗変位が

$$\left\langle \Delta\tilde{\mathbf{r}}^2 \right\rangle = 4m^* \left\{ \frac{\tilde{t}}{m^*} + e^{-\frac{\tilde{t}}{m^*}} - 1 \right\}$$

と表されることを示せ.

以下，初期条件 $\mathbf{r} = (0,0)$,$\mathbf{v} = (0,0)$ のもとで，**(2) の Langevin** 方程式を，時間刻みを $\Delta t = 0.01 t_{\mathrm{B}}$ として，半陰的 **Euler** 法により数値的に解き，以下の各問に答えよ．
[設問]

(4) $m^* = 0.1, 1.0, 10$ と慣性質量を系統的に変化させた際，時間区間 $[0, 100 t_{\mathrm{B}}]$ における粒子軌跡を作図せよ．粒子の位置座標は $10\Delta t$ ごとにデータを吐き出し，これらを折線で結ぶこと．また，慣性質量が増大するとブラウン運動の軌道がどの様に変化するか考察せよ．

(5) $m^* = 0.1, 1.0, 10$ に対して，時間区間 $[0.01 t_{\mathrm{B}}, 100 t_{\mathrm{B}})$ の平均二乗変位 $\left\langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \right\rangle$ をそれぞれ作図し，(3) の理論の結果と比較せよ．なお，$\langle \cdots \rangle$ は時間またはアンサンブル平均を十分に取った量であることを表す．さらに，上記時間区間の上限は半開であり，$100 t_{\mathrm{B}}$ に達していなくてもよい．また，慣性質量が増大させた時の平均二乗変位の変化を (4) の軌道の変化と関連させて考察せよ．[ヒント：弾道領域と拡散領域]

第 2 問 （古典分子動力学法:ポテンシャルカットオフの平滑化）

分子動力学計算においては, 分子間ポテンシャルにカットオフ長 r_{cut} を導入することで, 粒子間距離が $r > r_{\mathrm{cut}}$ を満たす粒子同士の力の計算を打ち切る．一方，多くの場合，カットオフ点 $r = r_{\mathrm{cut}}$ においては，力が不連続になるため，その度合いを小さくするために r_{cut} を長めに取る必要が生じる．一方，この問題を解決するために，以下の様に，カットオフを平滑化したポテンシャル

$$U(r) = U_0(r) - U_0(r_{\mathrm{cut}}) - U_0'(r_{\mathrm{cut}})(r - r_{\mathrm{cut}})$$

を導入することにする [1]．ここで $U_0'(r) = \frac{\mathrm{d}U_0(r)}{\mathrm{d}r}$ である．この時，このポテンシャルについて以下の各問いに答えよ．
[設問]

(1) $U(r_{\mathrm{cut}}) = 0, U'(r_{\mathrm{cut}}) = 0$ であることを示せ．（つまり，カットオフ点 $r = r_{\mathrm{cut}}$ においてポテンシャルも力も連続的に 0 に接続し，力の不連続性が無くなる．）

次に，$U_0(r)$ が Lennard-Jones ポテンシャル

$$U_0(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^{6} \right\}$$

で与えられる平滑化ポテンシャル $U(r_{ij})$ で相互作用する，質量 m 直径 a の 2 次元円盤粒子 1000 個を，1 辺 $L = 50a$ の 2 次元周期境界条件下に拘束する．ここでカットオフ長は $r_{\mathrm{cut}} = 2.0a$ とし，講義で扱ったものより少し短く取ることにする．この様な粒子の古典分子動力学シミュレーションに関する以下の各問いに答えよ．なお，シミュレーションでの長さの単位を a, 時間の単位を $t_0 = \sqrt{\frac{ma^2}{\epsilon}}$ とし，無次元温度（パラメータ）を $T^* = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{\epsilon}$ とする．
[設問]

(2) 結晶などの配置を最初期条件とし，Langevin 熱浴下, 温度 $T^* = 5.0$ で時間 $10t_0$，粒子を運動させた後の粒子配置を作図せよ．なおシミュレーションの時間刻みは $\Delta t = 0.01 t_0$ として数値積分せよ．

(3) (2) の後，Langevin 熱浴下, 温度を $T^* = 0.2$ に下げ，その後時間 $1500t_0$，粒子を運動させた後の粒子配置を作図せよ．なおシミュレーションの時間刻みは $\Delta t = 0.01 t_0$ として数値積分せよ．

(4) (3) の後，Langevin 熱浴を切り，粒子を Newton の運動方程式に切り替え，$100t_0$ 粒子を運動させる．この間の 1 粒子あたりのポテンシャルエネルギー, 運動エネルギー，それらの和（力学的エネルギー）をそれぞれ時間に対して図示し，力学的エネルギーが保存する（傾向を示す）ことを確かめよ．なお，Newton の運動方程式は速度 Verlet 法で，時間刻み $\Delta t = 0.001 t_0$ で数値積分せよ．また，作図の際は，ポテンシャルエネルギーや運動エネルギーが揺らぎ，それらに比べて力学エネルギーが一定になる様子が見やすくなる様に工夫せよ．

(5) 温度 T で熱平衡状態にある粒子の速度の各成分：例えば x 成分の分布関数は，以下の Maxwell-Boltzmann 分布

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_{\mathrm{B}} T}} e^{-\frac{m v_x^2}{2k_{\mathrm{B}} T}}$$

を満たすことが知られている．ここで，$f(v_x)$ に関する以下の性質：

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(v_x) \mathrm{d}v_x = 1$$

から，$\boxed{f(v_x)\text{ は速さの逆数の次元}}$ をもつことがわかる．これをもとに，$f(v_x)$ をこれまでと同様の流儀で無次元化すると，

$$\tilde{f}(\tilde{v}_x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi T^*}} e^{-\frac{\tilde{v}^2}{2T^*}}$$

となることを示せ．

(6) 実際のシミュレーションで得られた速度の分布関数 $f(v_x)$（規格化されたヒストグラム）が (5) の理論の結果と整合することを確かめよ．ただし，ヒストグラムの計算の際は，十分時間平均を取ること（例えば時間 t_0 ごとにデータを平均する）．

参考文献

[1] Shimada M, Oyama N (2020) Gas-liquid phase separation at zero temperature: Mechanical interpretation and implications for gelation. *arXiv:2011.12489 [cond-mat]*.