

壁の濡れ性から誘起される非平衡流体系ダイナミクスの変化

山本 凜 *1 中川尚子

最終更新日: 2024 年 2 月 6 日

*1 茨城大学 理学部理学科物理学コース 学部 4 年 物性理論グループ 中川研究室

目次

概要	2
第 1 章 系の設定	3
1.1 ハミルトニアン	4
1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル	4
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約	4
1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル	5
1.2 熱流	6
1.2.1 温度制御	6
第 2 章 実験の設定	8
2.1 追実験	10
2.2 重力と熱流を同時にかける	12
2.3 重力を先にかけて、熱流を後からかける	15
2.4 重力のみをかける	16
2.5 熱流のみをかける	17
2.6 重力と熱流を同時にかける（時間 10 倍）	18
2.7 重力を先にかけて、熱流を後からかける（時間 10 倍）	20
第 3 章 分析と考察	21
3.1 R_a, R_t マップ	21
3.2 ヒストグラム	24
3.3 空間的な揺らぎ	25
3.4 サイクル	28
3.5 サイクル 3d	29
3.6 ヒートマップ	30
第 4 章 まとめ	31
謝辞	31
参考文献	33

概要

やかんに火をかけて、湯を沸かすときのことを考えてほしい。やかんのフタには蒸気を逃すために穴が空いているが、それを塞ぐと、やかんの底よりも冷たいフタの裏に細かい水滴が付き、ある程度集まって塊となったらその水滴がポチャンと落ちる様子が想像できるだろう。先行研究によると、フタの裏に強い濡れ性を与えると、流体系は非定常で周期的なダイナミクスを示すことが分かっている。これは、「フタの裏付近での水蒸気形成、フタへの水の吸着、そして水の落下」を繰り返すというものである。本研究では、例にやかんを使うと、内部の水がフタの裏に引っ付いたり、落ちたりということを繰り返すことに興味を持ち、数値実験を用いて、その繰り返しに周期性があるか、そのフタの性質によって繰り返しの仕方に変化が生まれるかを調べたものである。

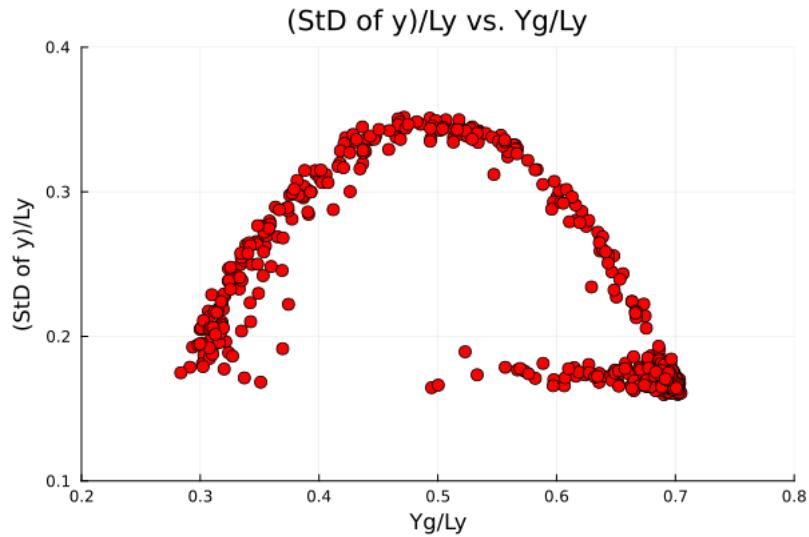


図 1

具体的には、上下に濡れた壁がつき、下向きに重力がかかり、温度差をつけた熱浴を上下に設定することで、上向きに熱流を流すことを考えた流体系を設計した。ただし、重力の強さと熱流の大きさを特徴づけるパラメータ mgL_y と $k_B\Delta T$ の比を 1 度としている。壁の濡れ性をパラメータ制御して、分子動力学計算を用いて数値実験を行い、系の重心位置と空間的なばらつきに焦点を当てて分析すると、周期的なダイナミクスが現れる系では、両者は相空間上で比較的安定した半円の閉軌道を描くことが分かった。[図 1](#) さらに、壁の濡れ性を強くしたときに、周期的なダイナミクスがより顕著に現れることも明らかになった。

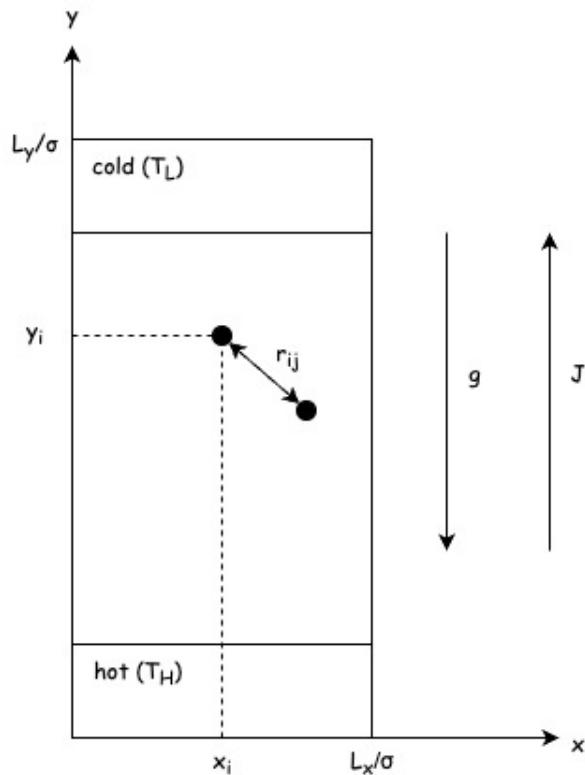
第1章

系の設定

この章では、問題とする系の設定について説明する。

2次元の気液共存系で、質量 m の粒子が N 個存在することを考え、系の上下には壁、左右には周期境界条件を課す。また、重力を y 軸負の向きにかけて、熱流を y 軸正の向きに流す。この熱流は、系の上下の領域にそれぞれ異なる温度を設定した langevin 热浴を使用することによってかけることとし、NVT-MD シミュレーションを実行する。また、各热浴の y 幅は 8σ となるように設定する。(図 1.1)

図 1.1



1.1 ハミルトニアン

結論は,

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \quad (1.1.0.1)$$

第1項から第4項まで順に, 運動エネルギー, 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル, 重力ポテンシャル, 壁-粒子間相互作用ポテンシャルである. 以降, 本節はこのハミルトニアンに至るまでの過程を述べる.

1.1.1 粒子-粒子間相互作用ポテンシャル

シミュレーションを行う際に, 典型的な粒子間相互作用ポテンシャルとして, 12-6 Lennard-Jones Potential を採用する.

$$\phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r; \varepsilon, \sigma) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

シミュレーション上では, カットオフ長 $r_{\text{cut}}^{\text{pair}} = 3\sigma$ とポテンシャルのシフトアップを考慮して

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r; r_{\text{cut}}^{\text{pair}}) = \left\{ \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r) - \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{\text{cut}}^{\text{pair}}) \right\} \theta(r_{\text{cut}}^{\text{pair}} - r)$$

のように書き換えたポテンシャルを用いている.

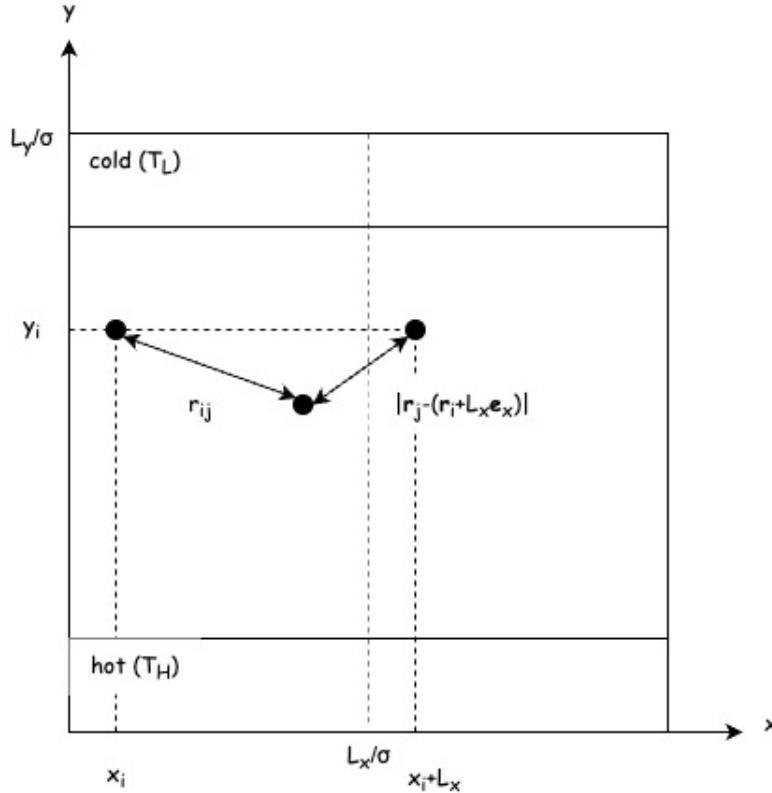
1.1.2 周期境界条件と最近接イメージ規約

周期境界条件を考慮すると, 粒子-粒子間相互ポテンシャルの総計はまず以下のように書ける.[1]

$$\sum_{n_x \in \mathbb{Z}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i \text{ for } n_x=0)}}^N \frac{1}{2} \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(|\mathbf{r}_i - (\mathbf{r}_j + L_x \mathbf{e}_x)|)$$

ここで, $n_x = 0$; オリジナルセルの中では, 同じ i, j ペアのポテンシャルエネルギーを 2 回足すことになるので, ポテンシャルを $1/2$ している. その上で, $j = i$ の場合は自分自身との相互作用になるため, これは除外する. $n_x \neq 0$ の場合, 粒子 j はイメージ粒子となるため, $j = i$ の場合も含めることになる. このときにもダブルカウントがあるので, ポテンシャルを $1/2$ している.

図 1.2



注目する系の粒子が常にオリジナルセルの中にとどまっているかのように MD 上で扱うには、

$$x_i = x'_i \mod L_x$$

のように、飛び出した粒子の x 座標 x'_i を上式のように x_i にシフトすれば良い。しかし、周期境界条件とセツトに、最近接イメージ規約として、粒子 i がオリジナル粒子と各イメージ粒子の中で最も近い粒子 j らとのみ相互作用をすることを課すと、粒子間の相互ポテンシャルの総計は先ほどよりも簡単に書けるようになる。

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij})$$

1.1.3 壁-粒子間相互作用ポテンシャル

$$\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r; \varepsilon^{\text{wall}}, \sigma^{\text{wall}}) = 4\varepsilon^{\text{wall}} \left[\left(\frac{\sigma^{\text{wall}}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma^{\text{wall}}}{r} \right)^6 \right]$$

パラメータは以下のようにする。

$$\begin{aligned}\varepsilon^{\text{wall}} &= (1.0 - R_d) \times \varepsilon \\ \sigma^{\text{wall}} &= (0.5 + R_t) \times \sigma \\ r_{\text{cut}}^{\text{wall}} &= \left(2^{1/6} + R_a\right) \times \sigma^{\text{wall}}\end{aligned}$$

カットオフ長とシフトアップを考慮して

$$\tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r; r_{\text{cut}}^{\text{wall}}) = \{\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r) - \phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(r_{\text{cut}}^{\text{wall}})\} \theta(r_{\text{cut}}^{\text{wall}} - r)$$

この系では, y 軸方向垂直に壁がついている. よって, 壁ポテンシャルは

$$V^{\text{wall}}(y; L_y) = \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(y; r_{\text{cut}}^{\text{wall}}) + \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{wall}}(L_y - y; r_{\text{cut}}^{\text{wall}})$$

のように書ける. これまでのことより, ハミルトニアンは式 (1.1.0.1) のように書き表せる.

$$H(\Gamma; g) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \quad (1.1.0.1)$$

1.2 熱流

langevin 热浴に侵入した粒子に対しては, brownian 動力学計算を実行する. その粒子 i にはたらく力 \mathbf{F}_i は LAMMPS のドキュメントに則った形式だと以下のように書き表せる.

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_i &= \mathbf{F}_i^c + \mathbf{F}_i^f + \mathbf{F}_i^r \\ \mathbf{F}_i^c &= -\nabla \left[\sum_{j>i}^N \tilde{\phi}_{\text{LJ}}^{\text{pair}}(r_{ij}) + mgy_i + V^{\text{wall}}(y_i) \right] \\ \mathbf{F}_i^f &= -\frac{m_i}{\text{damp}} \mathbf{v}_i \\ F_i^r &\propto \sqrt{\frac{k_B T m_i}{dt \text{damp}}}\end{aligned}$$

それぞれの力の説明を記す.

- \mathbf{F}^c : ポテンシャルを介して計算される力
- \mathbf{F}^f : 摩擦力
- \mathbf{F}^r : ランダム力

1.2.1 温度制御

2d kinetic temperature

$$T \equiv \frac{1}{Nk_{\text{B}}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

粒子 i が熱浴に侵入すると、その粒子の運動はランジュバン方程式に従う。侵入していないときは、 $\gamma = 0$ になり、正準方程式に等しくなる。

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \sqrt{2\gamma k_{\text{B}} T_{\nu}} \boldsymbol{\xi}_i(t) \\ \langle \xi_i^a(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi_i^a(t) \xi_j^b(t') \rangle &= \delta_{i,j} \delta_{a,b} \delta(t - t')\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\gamma(y_i) &= 1. \quad T_{\nu}(y_i) = T_{\text{H}}. \quad (0 < y_i < 8\sigma) \\ \gamma(y_i) &= 1. \quad T_{\nu}(y_i) = T_{\text{L}}. \quad (L_y - 8\sigma < y_i < L_y) \\ \gamma(y_i) &= 0. \quad (8\sigma < y_i < L_y - 8\sigma)\end{aligned}$$

第 2 章

実験の設定

この章では、行ったシミュレーションの設定についてそれぞれ説明をしていく。
系の上下両端のポテンシャルエネルギー差 mgL_y と運動エネルギー差 $k_B\Delta T$ の比を χ として以下のように設定する。

$$\chi \equiv \frac{k_B\Delta T}{mgL_y}$$

壁の濡れ性を制御する無次元パラメータを 3 つ用意する。

- R_d : 乾き具合.
 R_t : 壁の厚み.
 R_a : 引力幅.

これらを用いて、壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルは以下のように書き表す。

$$\begin{aligned}\varepsilon^{\text{wall}} &= (1.0 - R_d) \times \varepsilon \\ \sigma^{\text{wall}} &= (0.5 + R_t) \times \sigma, \\ r_{\text{cut}}^{\text{wall}} &= \left(2^{1/6} + R_a\right) \times \sigma^{\text{wall}}\end{aligned}$$

パラメータ (R_d, R_t, R_a) を変えることによって、壁-粒子間相互作用 LJ ポテンシャルが変わる。このときに、どのようにして粒子集団の様相が変化するかを見る。

本論では R_d は動かさずに、 R_t と R_a を少しづつ変えた系でシミュレーションをして、粒子集団の様相の変化を見たい。以下に示すのが、それらを動かす範囲である。

$$\begin{aligned}R_t &: 0.0 \sim 0.5 \\ R_a &: 0.0 \sim 3.0 - 2^{1/6} = 1.877538\dots\end{aligned}$$

数値実験上で実際に入力する値を以下に示す。本論では簡単のため簡略して示すことがある。

$$\begin{aligned}R_t &= 0.0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5 \\ R_a &= 0.0, 0.4693845, 0.938769, 1.4081535, 1.877538, 1.877538\end{aligned}$$

以下は R_t , R_a を変化させたときの LJ ポテンシャルがどのように変化するのかを可視化したグラフである。

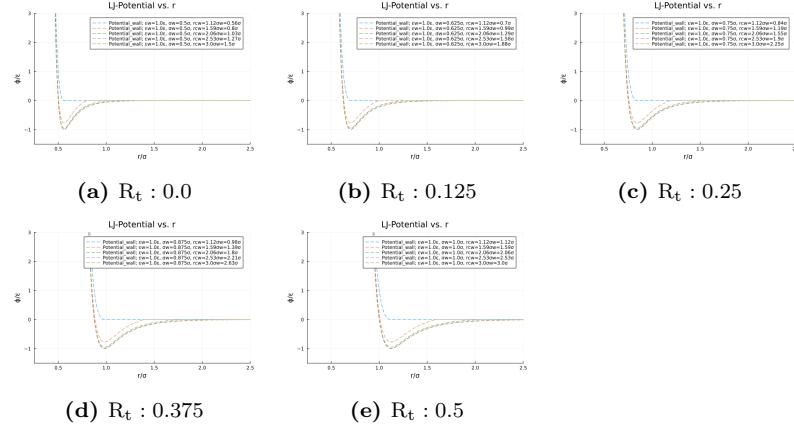


図 2.1: LJ-potential

本章の以降の実験は特記がない限り以下のパラメータで行うものとする。

- $N = 1250$: 粒子数
- $\rho\sigma^2 = 0.4$: 粒子数密度
- $L_x/\sigma = 39.528471 \simeq 39.5$: 系の x 幅
- $L_y/\sigma = 79.0569414 \simeq 79.0$: 系の y 幅
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$: 初期温度
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$: 熱浴の温度差
- $mg\sigma/\varepsilon = 0.0003999718779659611 \simeq 4.0 \times 10^{-4}$: 粒子にかかる重力の大きさ
- $dt\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 0.005$: シミュレーションにおける時間刻み。

以下に記すのは、今後解析をする際に示すシミュレーションについての時間に関する説明である。

t_i : シミュレーション開始時から、物理量を解析する際にデータを採用し始める時間。これ以後は定常状態であるとみなす。

t_f : シミュレーション開始時から、シミュレーションの終了時までの時間。

いずれの実験の場合も $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 0$ の時点では粒子は以下の画像のように、系に規則正しく並べられているとする。

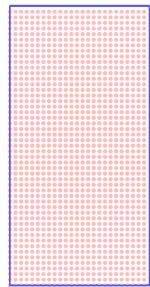


図 2.2: $N = 1250$

2.1 追実験

壁を完全に濡らしている状態を考えたいので, $r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0\sigma$ に設定する.

また, 重力をかけた状態で粒子が下に落ちきり, 定常状態にあるとみなせるまでシミュレーションを行ってから, 熱流をかけている.[2]

- $N = 5000$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma \simeq 79.0$
- $L_y/\sigma \simeq 158.1$
- $k_{\text{B}}T/\varepsilon = 4.3$
- $k_{\text{B}}\Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon \simeq 2.0 \times 10^{-4}$
- $t_f' \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$



図 2.3: $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$ でのスナップショット

続いて重力をかけた緩和後の系で、温度差のある熱浴をそれぞれ改めて以下のようにつけ、熱流をかけてシミュレーションをしている。

- $\chi = k_B \Delta T / mgL_y = 1.265$
- $k_B \Delta T / \varepsilon = 0.04$
- $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 5.0 \times 10^5$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 1.0 \times 10^6$

$(R_t = 0.5, R_a = 3.0 - 2^{1/6})$ で実験を行う。このときには、 $(\varepsilon^{\text{wall}} = \varepsilon, \sigma^{\text{wall}} = \sigma, r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0\sigma^{\text{wall}})$ になるので、 $\phi_{\text{LJ}}^{\text{wall}} = \phi_{\text{LJ}}$ ということになり、先行研究と同じシミュレーションを行うことができる。

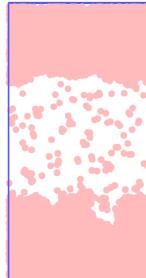


図 2.4: $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 1.0 \times 10^6$ でのスナップショット

2.2 重力と熱流を同時にかける

以下のように, R_a と R_t を少しづつ変えた系を設定して, それぞれシミュレーションをした.

	$R_a : 0.0$	$R_a : 0.4693$	$R_a : 0.9387$	$R_a : 1.408$	$R_a : 1.877$
$R_t : 0.0$	a	b	c	d	e
$R_t : 0.125$	f	g	h	i	j
$R_t : 0.25$	k	l	m	n	o
$R_t : 0.375$	p	q	r	s	t
$R_t : 0.5$	u	v	w	x	y

参考のために, 各パラメータの値を変えることによって, カットオフ長と衝突直径がどのように変わるのがわかるかを示す.

$$\begin{aligned} R_a = 0.0 &\Rightarrow r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 2^{1/6} \sigma^{\text{wall}} \\ R_a = 1.877 &\Rightarrow r_{\text{cut}}^{\text{wall}} = 3.0 \sigma^{\text{wall}} \\ R_t = 0.0 &\Rightarrow \sigma^{\text{wall}} = 0.5\sigma \\ R_t = 0.5 &\Rightarrow \sigma^{\text{wall}} = \sigma \end{aligned}$$

である.

パラメータを確認する.

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 39.5\dots$
- $L_y/\sigma = 79.0\dots$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon = 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

この際の粒子集団の様相は以下のようになる.



(a) $R_a = 0.0, R_t = 0.0$ (b) $R_a = 0.469, R_t = 0.0$ (c) $R_a = 0.938, R_t = 0.0$ (d) $R_a = 1.408, R_t = 0.0$ (e) $R_a = 1.877, R_t = 0.0$



(f) $R_a = 0.0, R_t = 0.125$ (g) $R_a = 0.469, R_t = 0.125$ (h) $R_a = 0.938, R_t = 0.125$ (i) $R_a = 1.408, R_t = 0.125$ (j) $R_a = 1.877, R_t = 0.125$



(k) $R_a = 0.0, R_t = 0.250$ (l) $R_a = 0.469, R_t = 0.250$ (m) $R_a = 0.938, R_t = 0.250$ (n) $R_a = 1.408, R_t = 0.250$ (o) $R_a = 1.877, R_t = 0.250$



(p) $R_a = 0.0, R_t = 0.375$ (q) $R_a = 0.469, R_t = 0.375$ (r) $R_a = 0.938, R_t = 0.375$ (s) $R_a = 1.408, R_t = 0.375$ (t) $R_a = 1.877, R_t = 0.375$



(u) $R_a = 0.0, R_t = 0.500$ (v) $R_a = 0.469, R_t = 0.500$ (w) $R_a = 0.938, R_t = 0.500$ (x) $R_a = 1.408, R_t = 0.500$ (y) $R_a = 1.877, R_t = 0.500$

図 2.5: リンク先の動画は $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに表示. スナップショットは $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = t_f\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2}$ 時.

重心位置 Y_g を系の y 幅でスケーリングして、時系列プロットすると、

$$Y_g \equiv \bar{y}_i = \frac{1}{N} \sum_i^N y_i$$

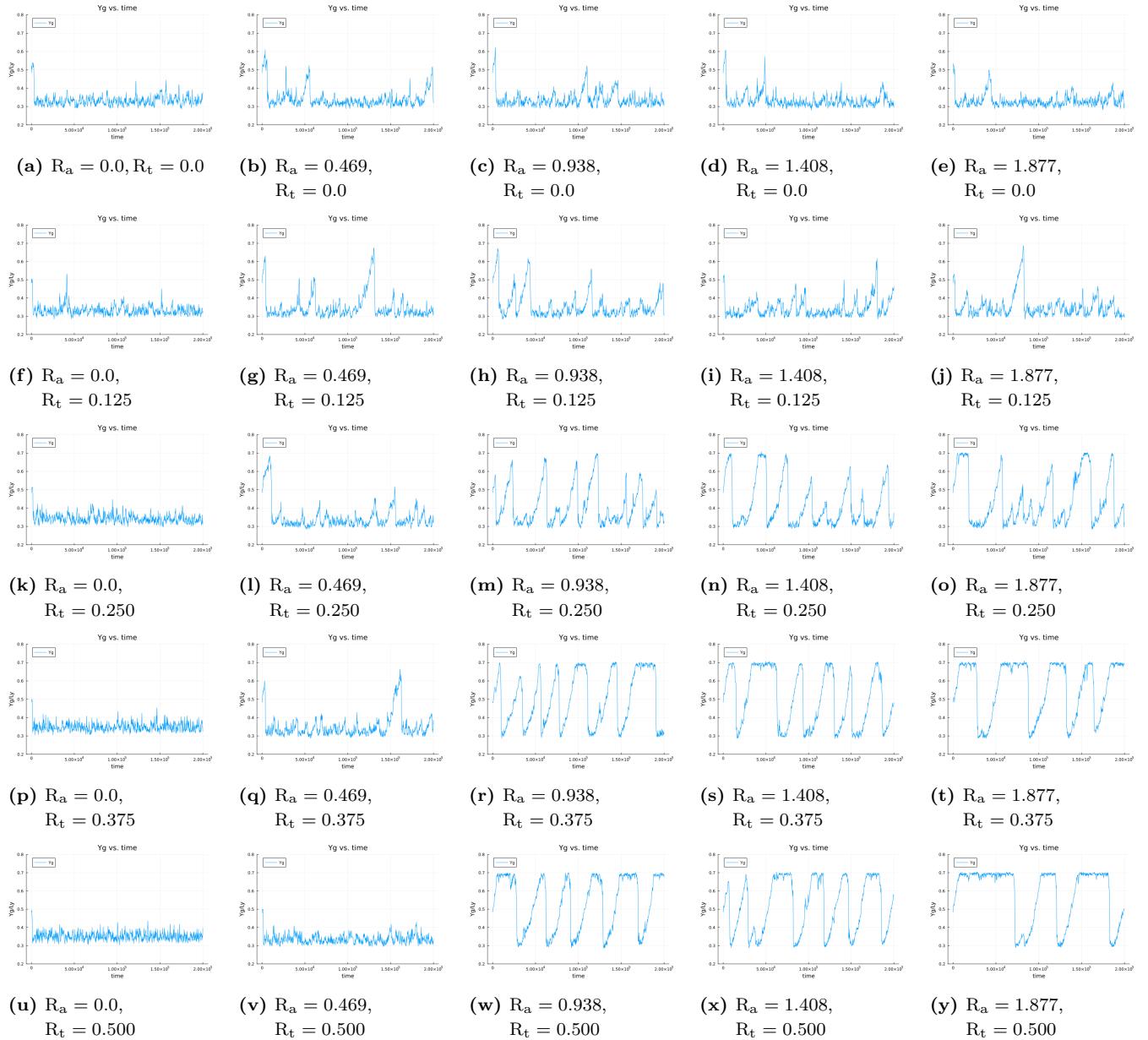


図 2.6: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.3 重力を先にかけて、熱流を後からかける

以下は、追実験のときと同じように、まず重力のみをかけて、粒子集団が落ちきってから熱流をかけると同時に測定を開始するものである。

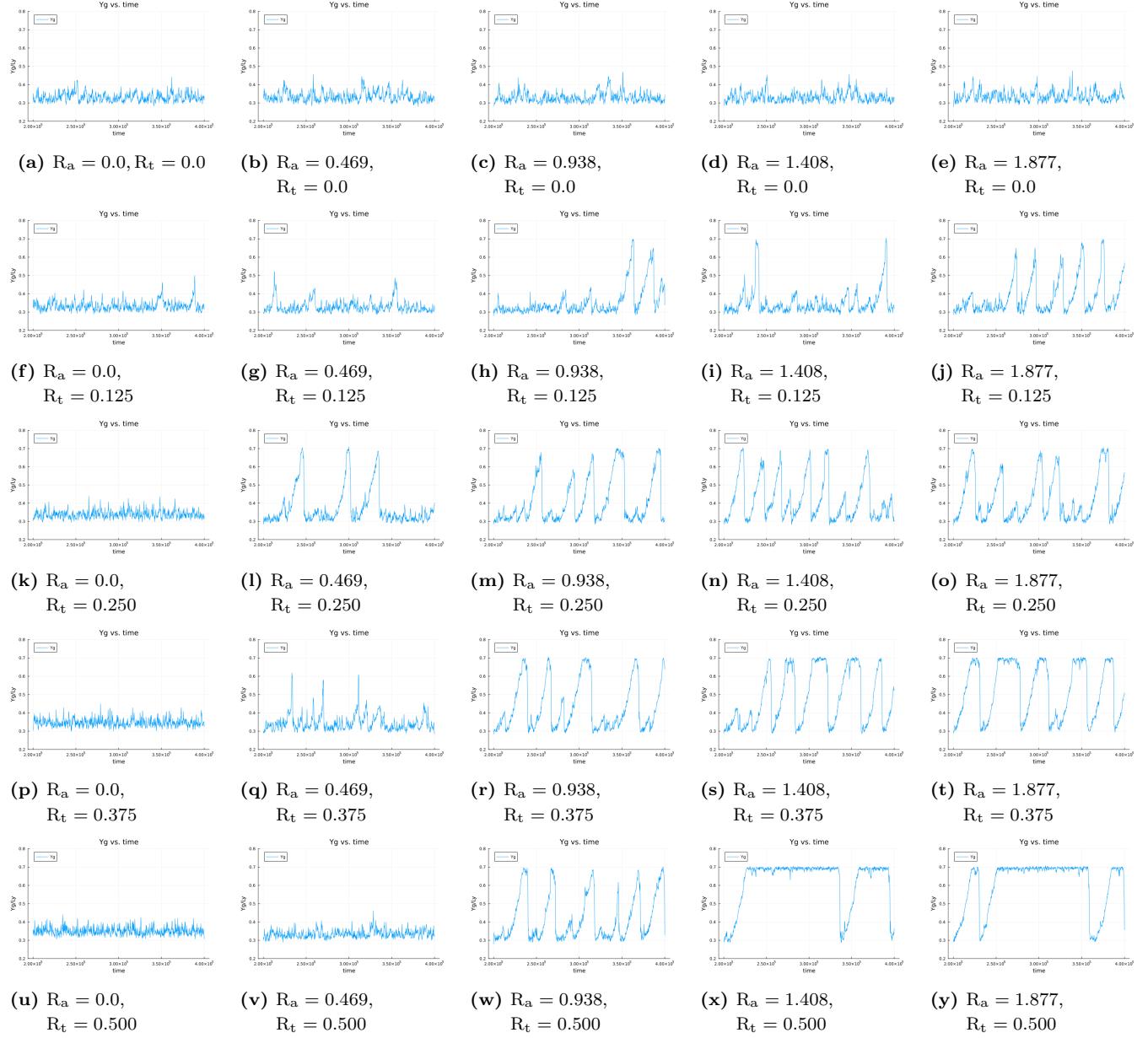


図 2.7: $t_i = 2.0 \times 10^5, t_f = 4.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット .

2.4 重力のみをかける

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 39.5\dots$
- $L_y/\sigma = 79.0\dots$
- $k_{\text{B}}T/\varepsilon = 0.43$
- $k_{\text{B}}\Delta T/\varepsilon = 0.0$
- $mg\sigma/\varepsilon = 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

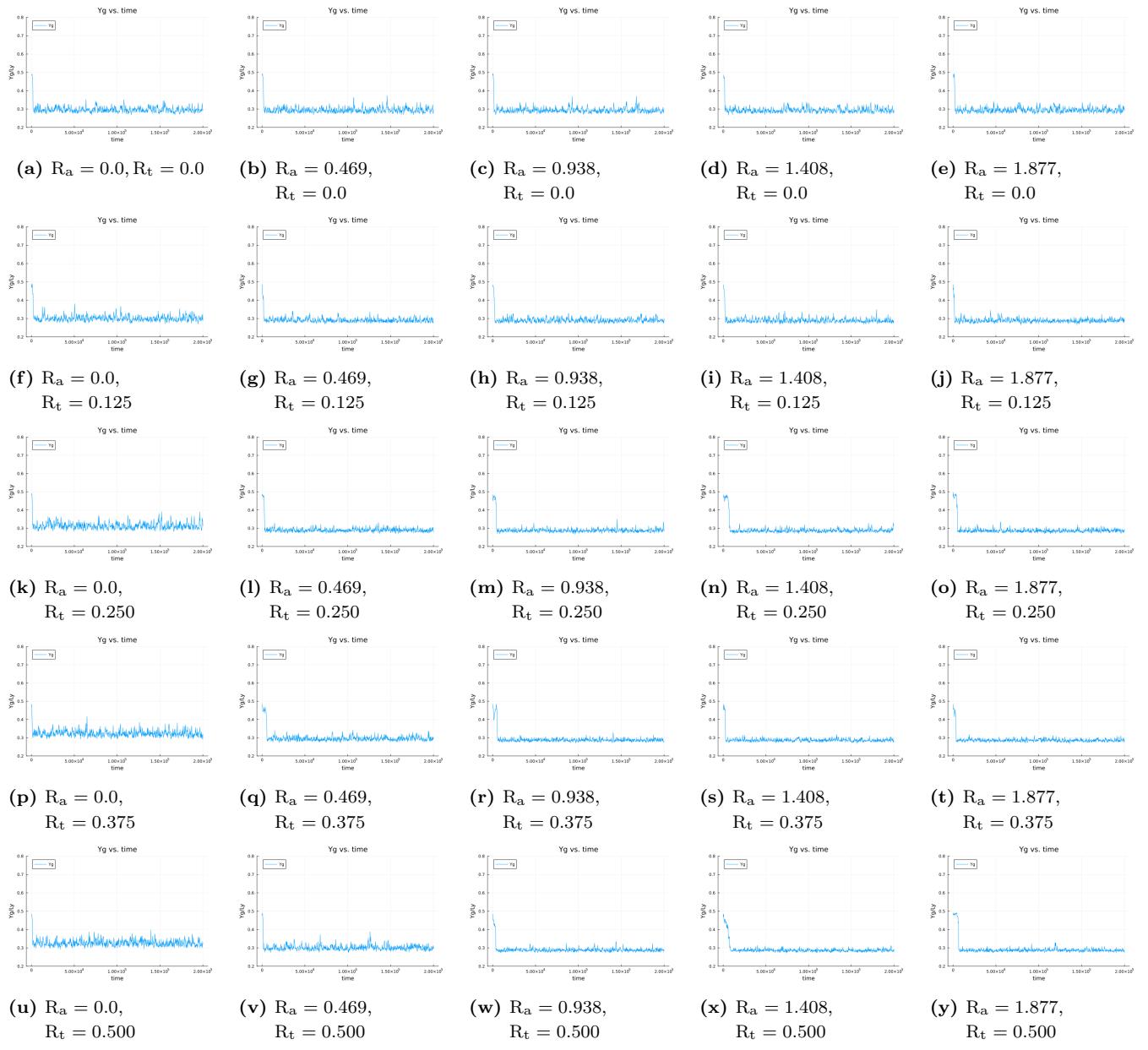


図 2.8: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.5 熱流のみをかける

- $N = 1250$
- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 39.5\dots$
- $L_y/\sigma = 79.0\dots$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$

- $k_B \Delta T / \varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma / \varepsilon = 0.0$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^5$

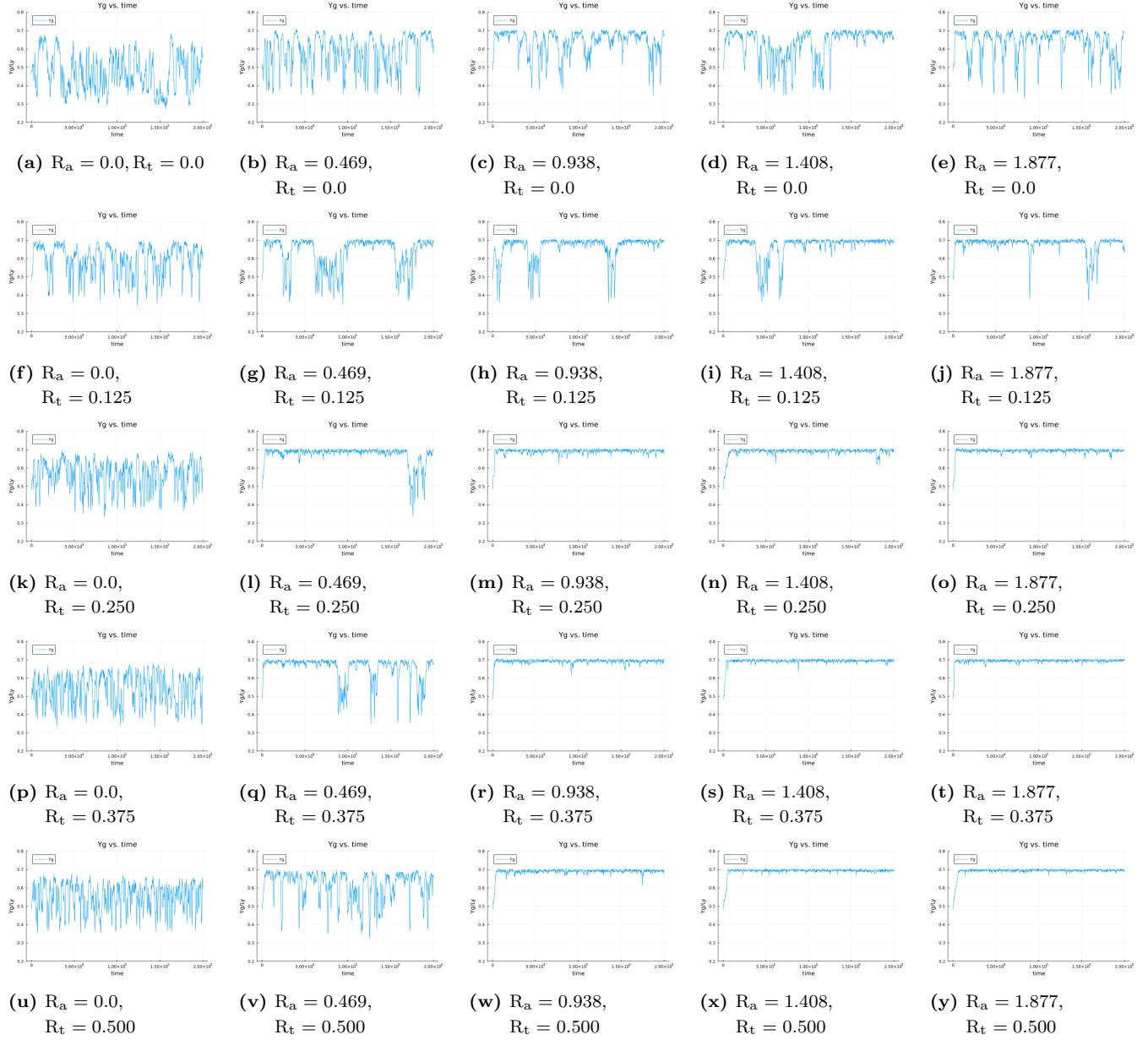


図 2.9: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^5, dt \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

2.6 重力と熱流を同時にかける (時間 10 倍)

- $N = 1250$

- $\rho\sigma^2 = 0.4$
- $L_x/\sigma = 39.5\dots$
- $L_y/\sigma = 79.0\dots$
- $k_B T/\varepsilon = 0.43$
- $k_B \Delta T/\varepsilon = 0.04$
- $mg\sigma/\varepsilon = 4.0 \times 10^{-4}$
- $t_f \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2.0 \times 10^6$



図 2.10: $t_i = 0, t_f = 2.0 \times 10^6, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

2.7 重力を先にかけて、熱流を後からかける (時間 10 倍)

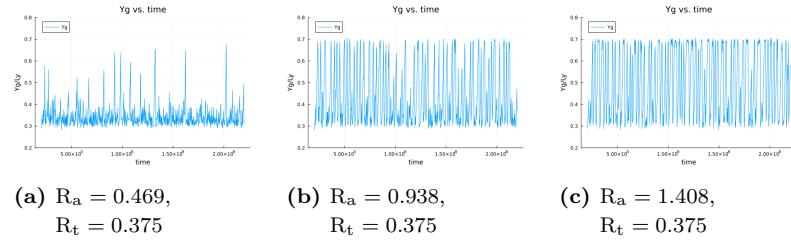


図 2.11: $t_i = 2.0 \times 10^5$, $t_f = 2.2 \times 10^6$, $t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 2000$ ごとにプロット.

第3章

分析と考察

この章では、第2章において行ったシミュレーションを用いて、それぞれ分析と考察をしていく。適宜文脈に則した分析画像を提示するが、入りきらない部分は付録??に収録する。

以降の解析は定常状態であるとみなせる、 $t_i \sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 4.0 \times 10^4$ からのデータを用いてプロットすることにしている。定常状態であるとみなせる時間については議論する必要がある。

3.1 R_a, R_t マップ

重心位置の標準偏差は以下のように書くことができる。

$$\sigma(Y_g) = \sqrt{\frac{1}{N_D} \sum_{t=t_i}^{t=t_f} (Y_g(t) - \bar{Y}_g)^2}$$

これは、時間発展する重心位置のばらつき具合を意味する。後述する空間的なばらつきとは定義から見ても分かることおり異なる量である。

重心位置の標準偏差について同時プロットで表してみる。

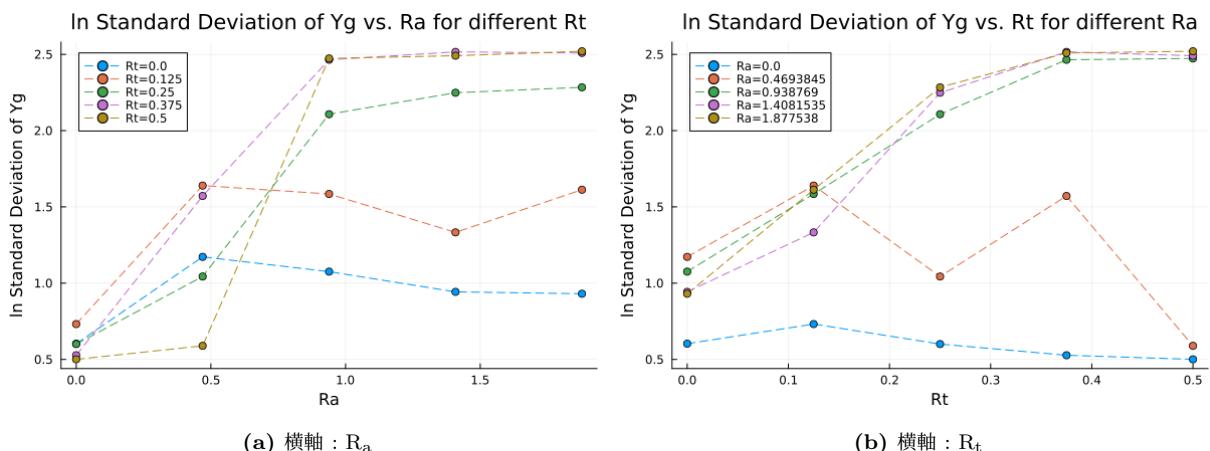


図 3.1: 縦軸：重心位置の標準偏差の対数プロット

図 2.6v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 2.6w $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間をもっと詳しく見る。

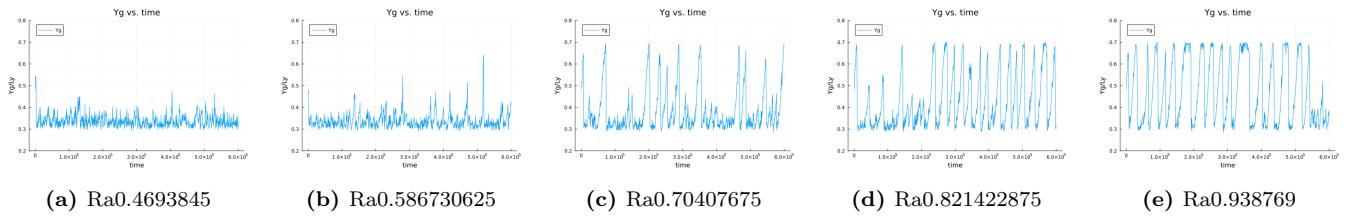


図 3.2: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^5, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 600$ ごとにプロット.

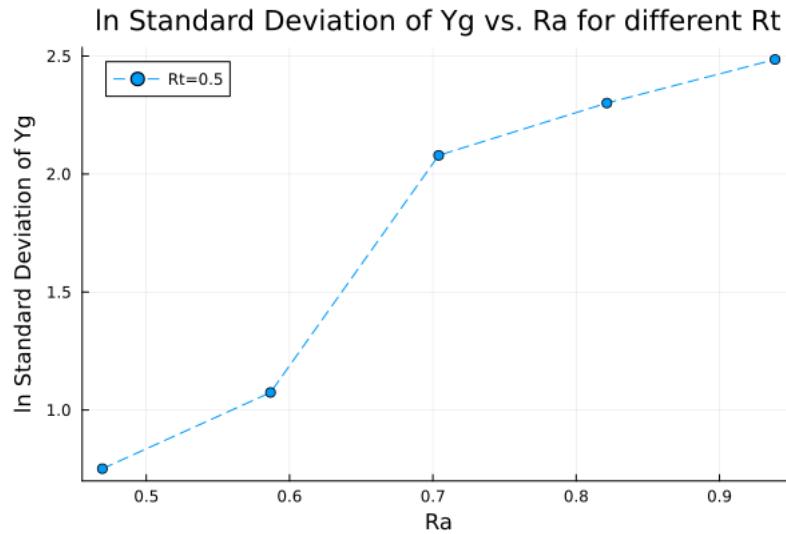


図 3.3

図 3.2c $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 3.2e $R_a = 0.938, R_t = 0.5$ の間を詳しく見る.

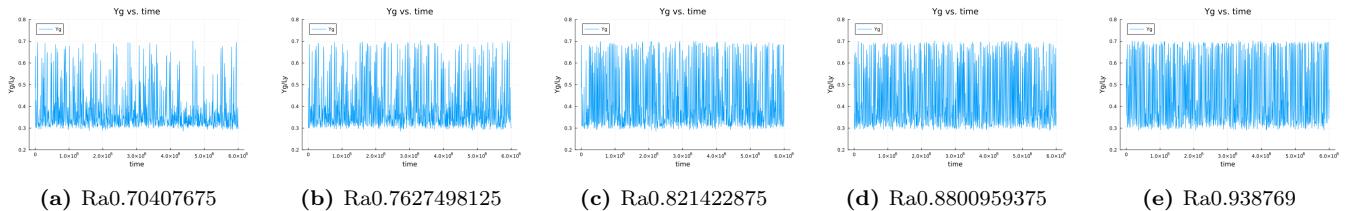


図 3.4: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 6000$ ごとにプロット.

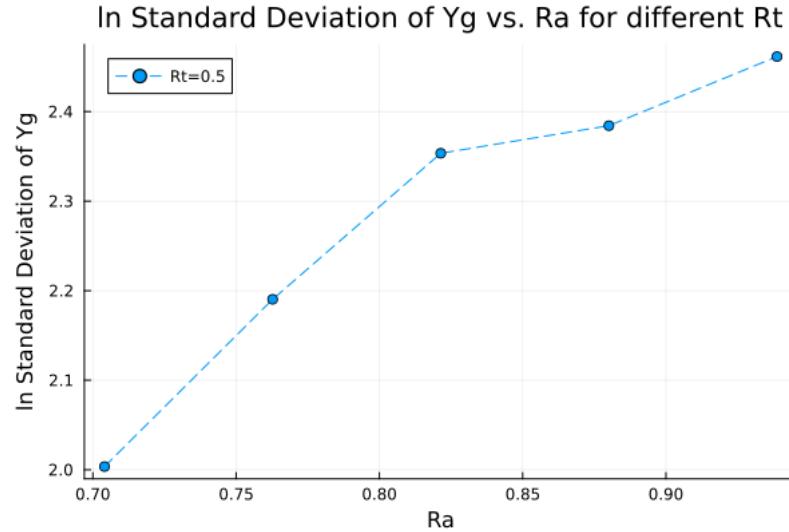


図 3.5

先の分析では、時間プロットの幅が大きい可能性があるため、図 2.6v $R_a = 0.469, R_t = 0.5$ と図 2.6w $R_a = 0.938, R_a = 0.5$ の間のプロット幅を小さくしたデータを使う。その際、簡単のため、 $R_a = 0.5 \sim 1.0$ の間を見ることにする。

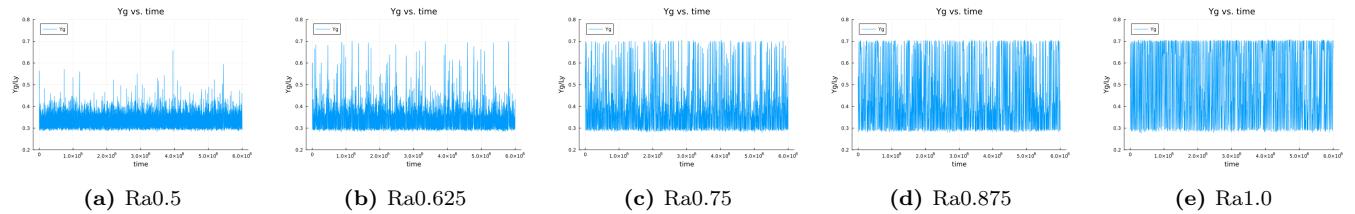


図 3.6: $t_i = 0, t_f = 6.0 \times 10^6, t\sqrt{\epsilon/m\sigma^2} = 50$ ごとにプロット。

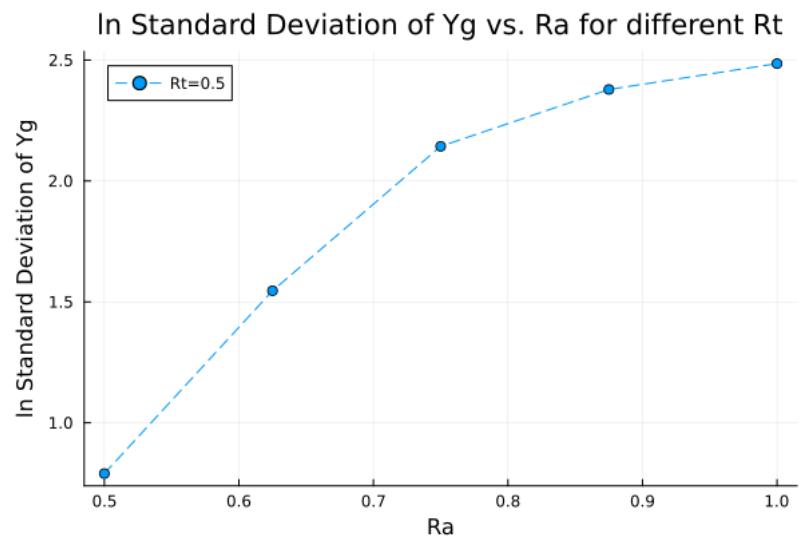


図 3.7

図 3.7 からも見て分かるように, $R_t = 0.5$ において, R_a の値を大きくするほど, 各系の重心位置の時間発展はばらつきが小さくなると言うことがわかる.

3.2 ヒストグラム

図 2.6 の結果をそれぞれ正規化したヒストグラムにして表す.

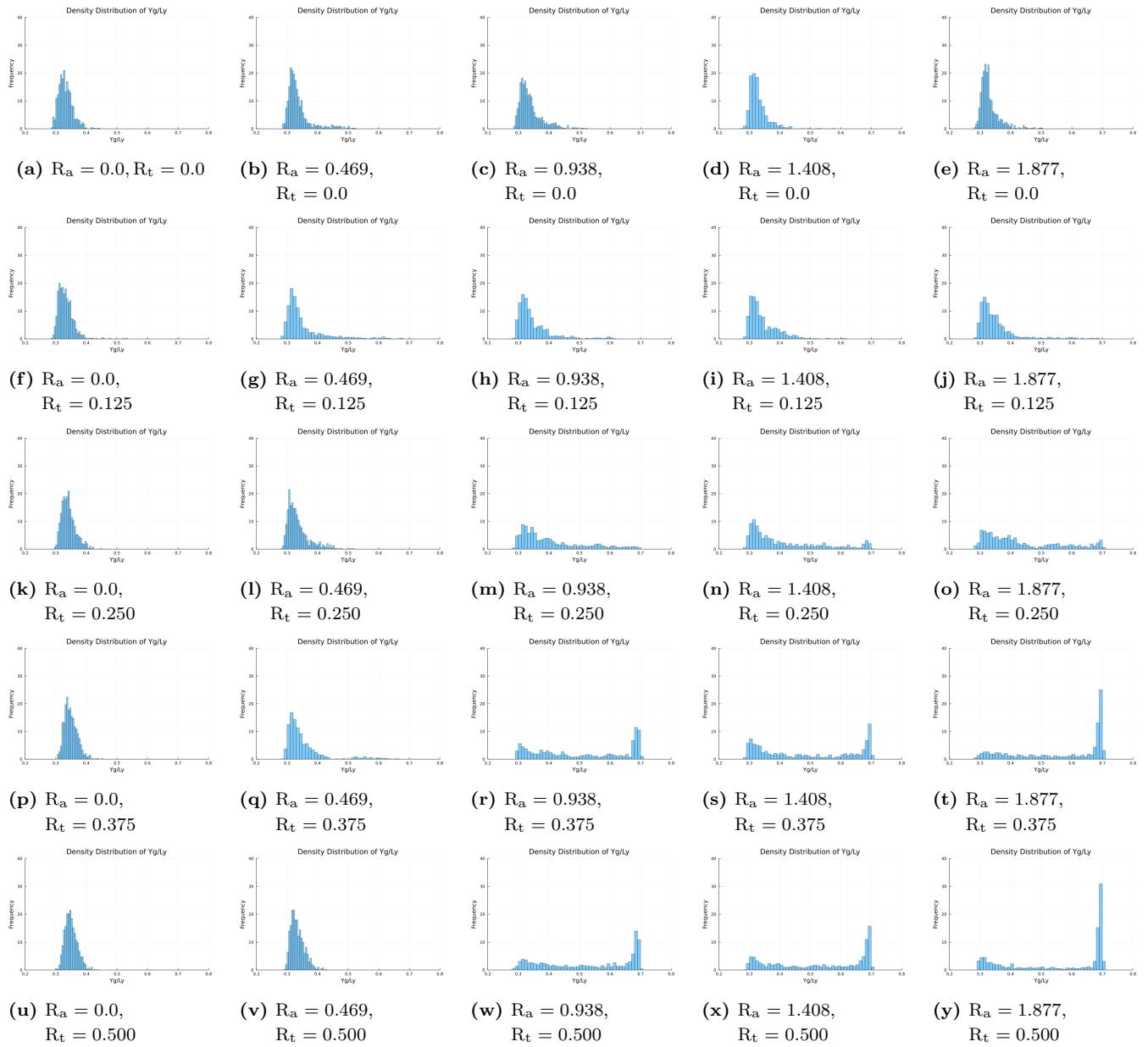


図 3.8: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに Y_g をプロットしたもののヒストグラム. ビン数は共通で 50 本.

3.3 空間的な揺らぎ

粒子集団のばらつき具合, 空間的な揺らぎを時系列で考える.

$$\begin{aligned}
\sigma_y(t) &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - \bar{y}_i(t))^2} \\
&= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - Y_g(t))^2} \\
&= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t)^2 - Y_g(t)^2}
\end{aligned}$$

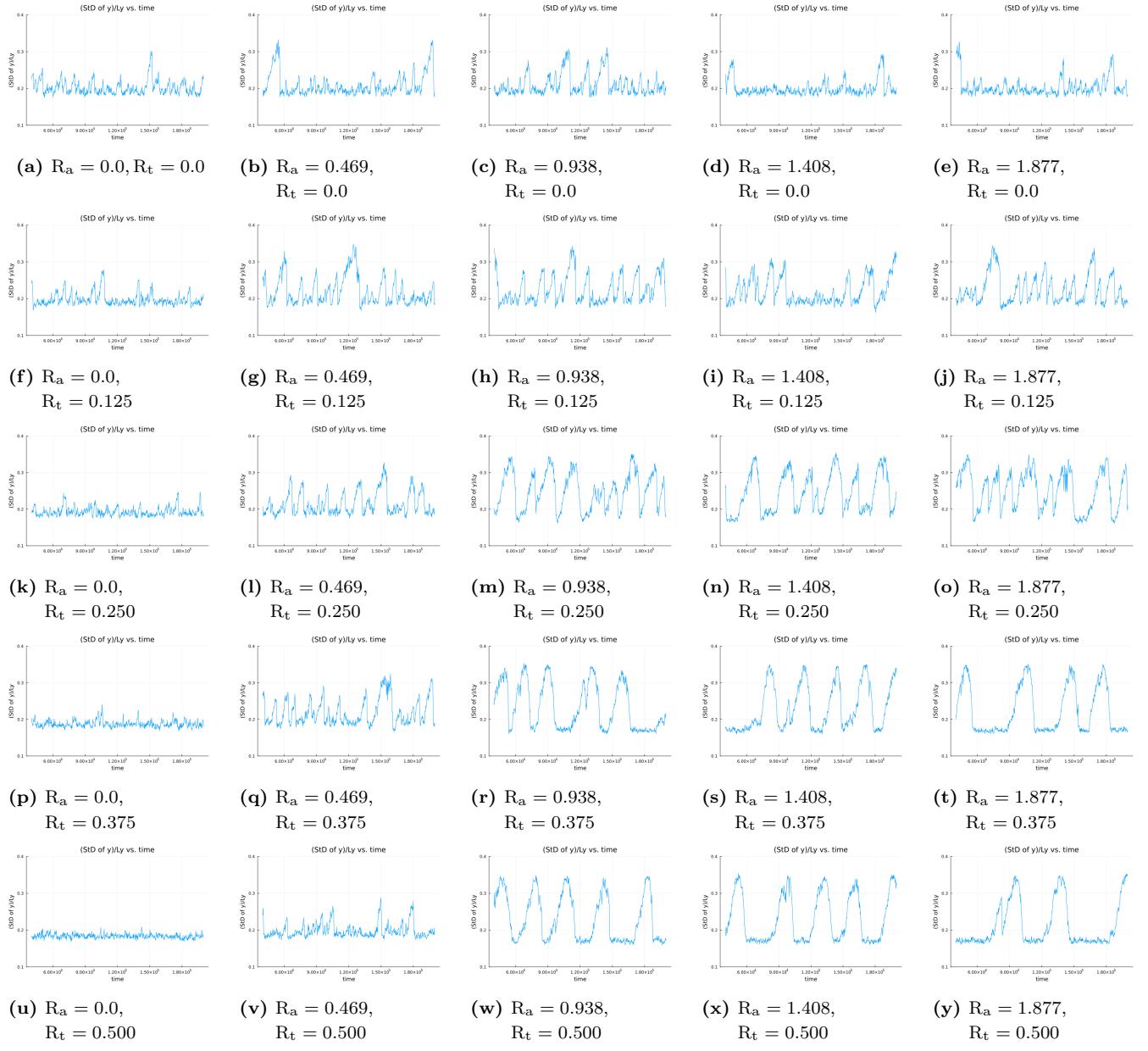


図 3.9: $t_i = 4.0 \times 10^4$, $t_f = 2.0 \times 10^5$, $dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005$, $t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとに重心の空間的な揺らぎを時系列プロット.

3.4 サイクル

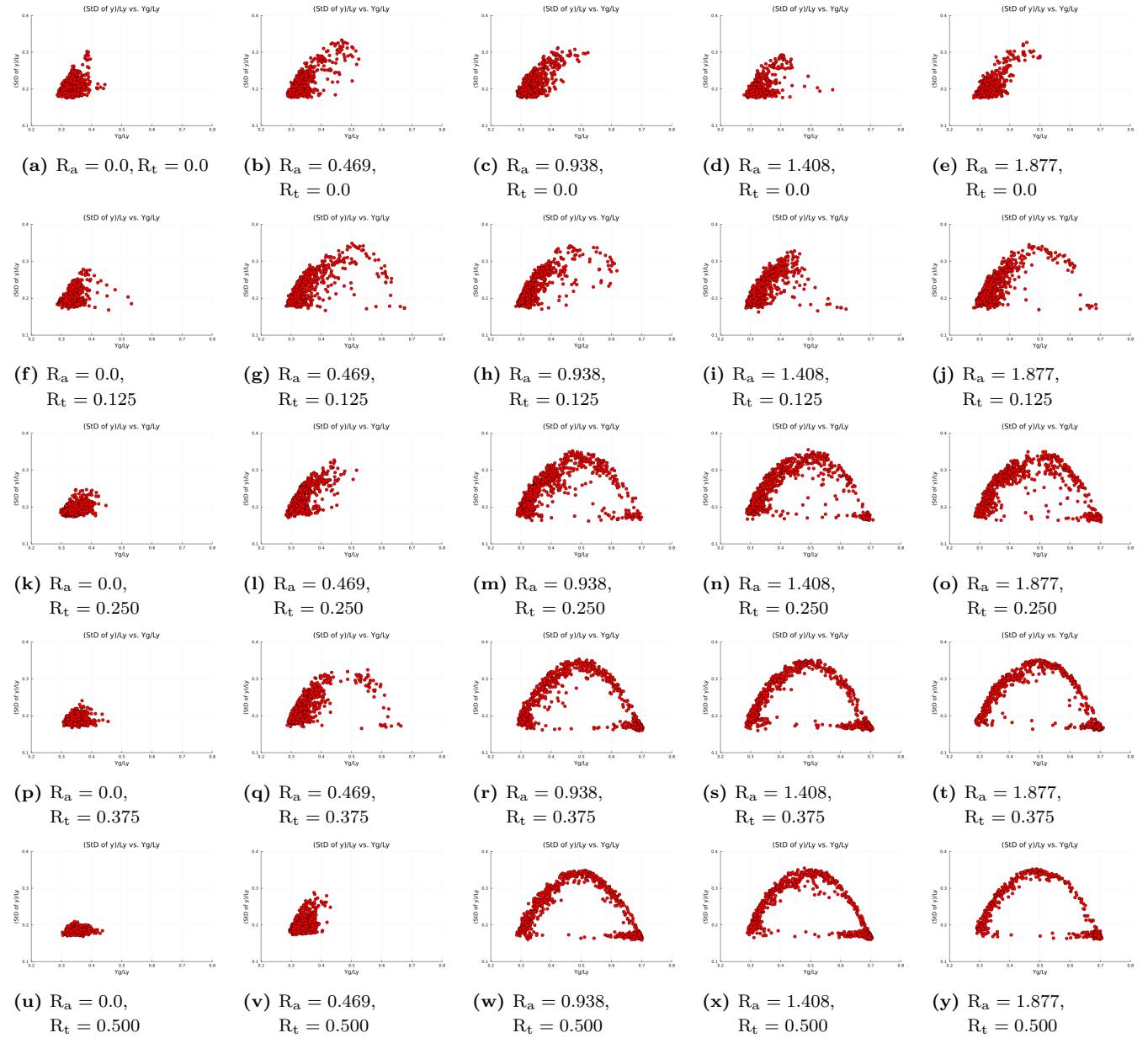


図 3.10: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

3.5 サイクル 3d

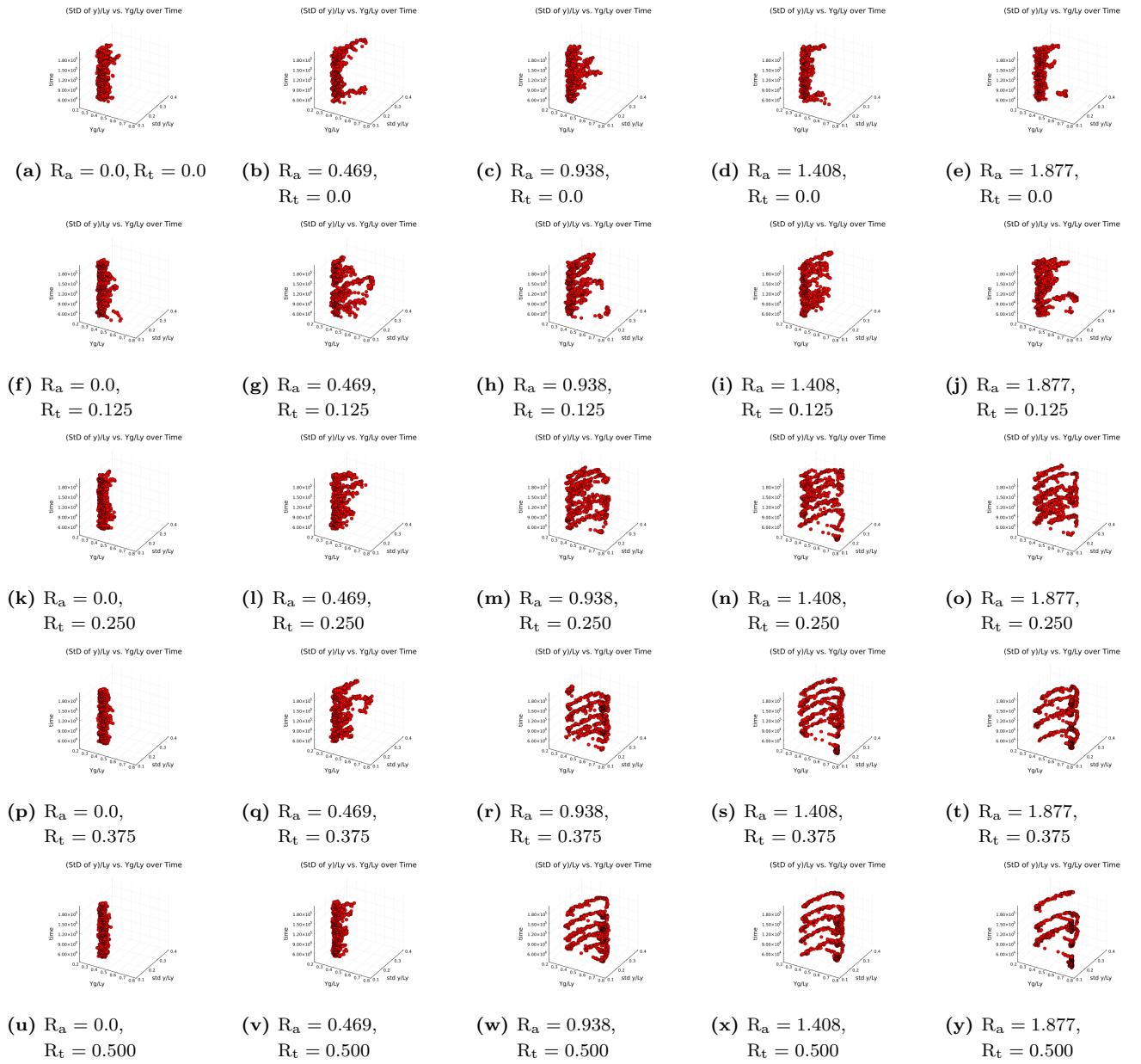


図 3.11: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット.

3.6 ヒートマップ

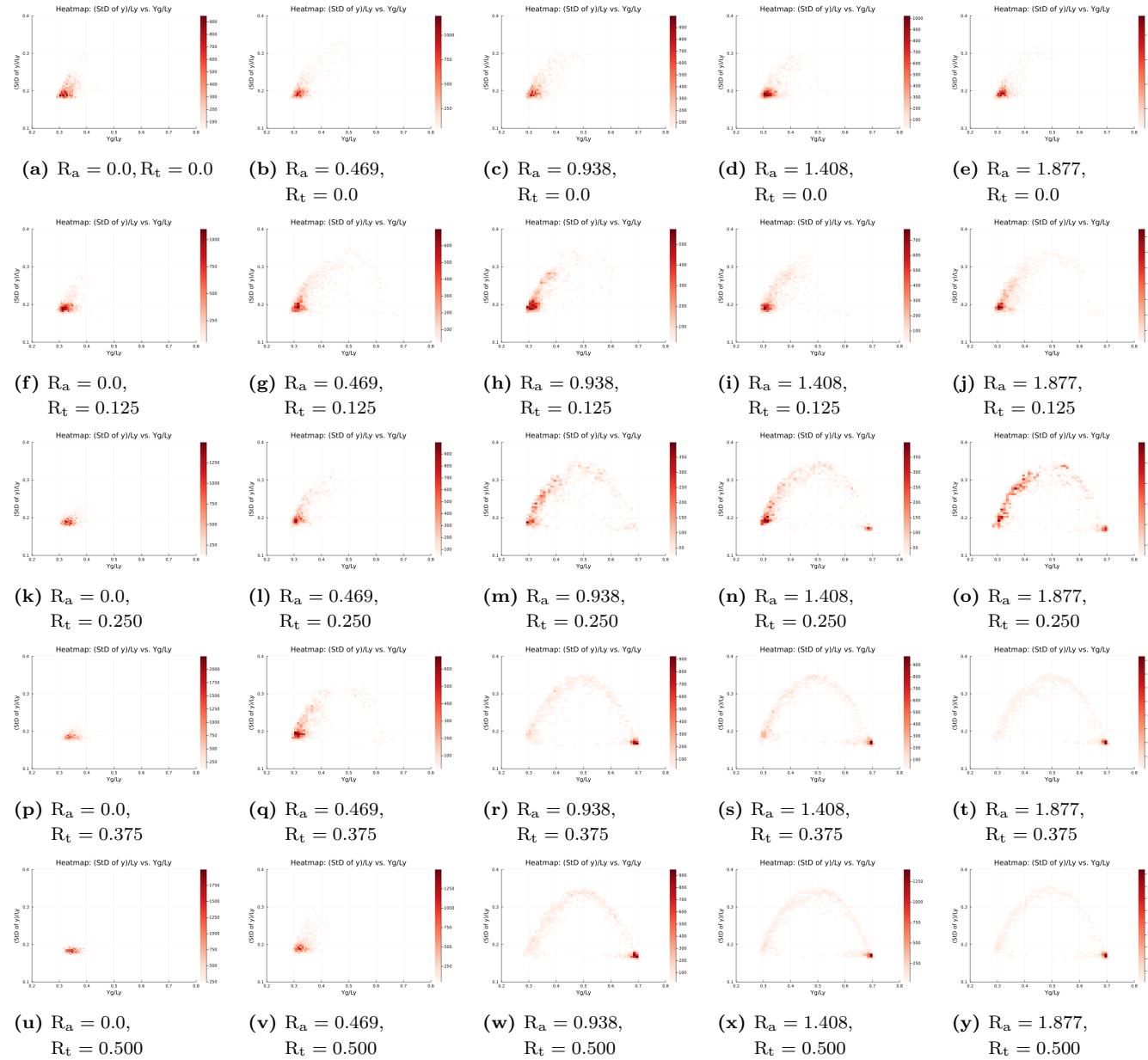


図 3.12: $t_i = 4.0 \times 10^4, t_f = 2.0 \times 10^5, dt\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 0.005, t\sqrt{\varepsilon/m\sigma^2} = 200$ ごとにプロット。

第4章

まとめ

謝辞

参考文献

- [1] 渡邊孝信. 分子動力学法と原子間ポテンシャル. 森北出版, 2023.
- [2] 吉田旭. 茨城大学.