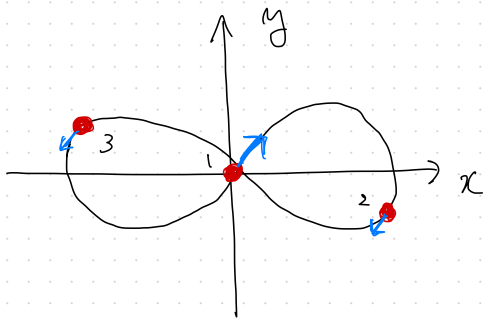
「計算機実験 II」実習 3 (2023-12-08)

本日 20:00 までに ITC-LMS の「実習 3 (2023/12/08) 出席・アンケート」に回答してください

- 自習課題
  1. オイラー法、Runge-Kutta 法の復習 (計算機実験 I 講義 2)
  2. 計算機実験 I 実習 2 レポート課題 1, 2, 4 の復習
- レポート課題*1
  1. 重力相互作用する N 質点系の運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\sum_{j \neq i} G m_i m_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \qquad i = 1, \ldots, N$$

  は、$N \geq 3$ の場合には求積可能ではないが、これまで様々な特殊解が得られている。3 体問題 ($N = 3$) においては、オイラーの直線解、ラグランジュの三角解に加え、3 体が単一の閉曲線上を運動する「8 の字解」が知られている。3 体は等しい質量 $m_i = 1$ を持ち、$z = 0$ の平面上を運動しているとする。また、重力定数 $G = 1$ とする。初期条件として $(x_1, y_1) = (0, 0)$, $(x_2, y_2) = -(x_3, y_3)$, $(\dot{x}_1, \dot{y}_1) = (0.695804, 1.67860)$, $(\dot{x}_2, \dot{y}_2) = (\dot{x}_3, \dot{y}_3) = -\frac{1}{2}(\dot{x}_1, \dot{y}_1)$ とする (重心と全運動量はゼロ)。初期条件 (x_2, y_2) を変えて、シンプレクティック積分法により軌道を求め、「8 の字解」となる条件を探せ。またその時の周期を見積もってみよ



  2. 蔵本模型は同期現象を記述する数学モデルである。蔵本模型では、それぞれ異なる固有振動数 ω_i を持つ N 個の振動子の間に非線形相互作用が働いている。支配方程式は以下の形で表される

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^{N} \sin(\theta_j - \theta_i) \qquad i = 1, 2, \ldots, N$$

  ここで、θ_i は i 番目の振動子の位相、K は結合定数である。結合定数 K が小さいとき、振動子はそれぞればらばらに振動するが、K がある臨界値 K^* を超えると同期するようになる。同期の度合いは複素秩序変数

$$r(t) e^{i\Psi(t)} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i\theta_j(t)}$$

  の絶対値 $r(t)$ により測ることができる。固有振動数 ω_i は平均 0、分散 1 の正規分布に従いランダムに分布、また $t = 0$ において θ_i は $[0, 2\pi]$ に一様分布しているとして、常微分方程式を数値的に解き、$r(t)$ の時間依存性をプロットせよ。$N = 64, 128, 256, \cdots$ について、$r(t)$ の長時間平均値の結合定数 K の依存性を観察し、臨界点 K^* を見積もってみよ。(高速化の

*1 レポート No.2 [2024/01/19 (金) 締切 (予定)] では、今回のレポート課題から 1 問、実習 4 のレポート課題から 1 問、合計 2 問を選び解答

ヒント: 複素秩序変数 $(r(t), \Psi(t))$ を用いると、支配方程式の相互作用項は $Kr\sin(\Psi - \theta_i)$ と変形できる)

3. 重力相互作用する N 粒子系を考える

$$V = -\sum_{j<k}^{N} \frac{Gm^2}{(r_{jk}^2 + \delta^2)^{1/2}} \qquad (\delta \text{ はエネルギーの発散を防ぐための小さな定数})$$

$t = 0$ で粒子は半径 R の球内に一様にランダムに分布しているとする (棄却法で生成)。また、速度は分散 σ^2 のマクスウェルボルツマン分布 ($3N$ 次元正規分布) に従ってランダムに分布しているとする (それぞれの成分を Box-Muller 法で生成)。運動エネルギーの初期値がポテンシャルエネルギーの絶対値に比べ十分に小さい時、この粒子系は自己重力で崩壊する。分散 σ^2 を調整して、ビリアル比 $r_\mathrm{v} \equiv K/|V|$ が 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 となるような初期速度分布を準備し、シンプレクティック積分法により、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、ビリアル比、中心にできるコアの半径の時間依存性をプロットせよ。$G = R = M(\equiv Nm) = 1$ となる単位系を使い、ソフトニングパラメータ $\delta = 0.01$、粒子数 N は 10^3 程度で $t = 10$ 程度まで計算してみよ

4. アルゴン原子間の相互作用はレナード・ジョーンズ型ポテンシャル

$$V = -\sum_{j<k}^{N} \epsilon\Big[\Big(\frac{\sigma}{r_{jk}}\Big)^{12} - 2\Big(\frac{\sigma}{r_{jk}}\Big)^{6}\Big] \qquad (\epsilon/k_B = 119.8 \text{ K}, \sigma = 3.822 \text{ Å})$$

でよく記述される。1 片の長さ L の箱の中に N 個のアルゴン原子が入っている状況を考える。周期境界条件を考え、ポテンシャルエネルギーは minimum image convention により計算する。シンプレクティック積分法により、温度、圧力、内部エネルギーの平均値を計算するプログラムを作成せよ。$m = \sigma = \epsilon = 1$ となる単位系を使い、時間きざみ幅は 0.005 程度に取る。粒子の初期位置は面心立方格子とする。まず、$N = 32$ の系について計算を行い、速度を反転した場合に初期状態に戻ることを確認せよ。次に $N = 108$、数密度 $\rho = N/V = 1.2$ の系について、$t = 10$ まで 10 ステップごとに温度 $T = 1$ となるように速度スケーリング、その後 $t = 30$ までエネルギー一定のシミュレーションを行い、温度、圧力、1 粒子あたりの内部エネルギーの期待値を計算せよ

5. Nose-Hoover Chain 法を用いた分子動力学法により、調和ポテンシャルあるいは非調和ポテンシャル中の 1 粒子のカノニカル分布を調べる

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\
\frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{p_s}{Q}p \\
\frac{dp_s}{dt} &= \frac{p^2}{m} - k_BT - \frac{p_r}{Q}p_s \\
\frac{dp_r}{dt} &= \frac{p_s^2}{Q} - k_BT
\end{aligned}$$

$m = 1$, $Q = 1$, $k_BT = 1$ として、4 次の Runge-Kutta 法で運動方程式を解き、その位相空間上での軌道を確認せよ (時間刻み $\Delta = 0.01$ で $t = 10^4$ 程度まで計算せよ)。また、座標 x と運動量 p のヒストグラムを作成し、カノニカル分布となっていることを確認せよ。一方、自由度 1 の Nose-Hoover 熱浴 (上の式で p_r のないもの) の場合には、熱平衡状態とはならないことを示せ