

## 射影演算子を用いた粗視化粒子モデルの構築

金城友之、兵頭志明 (株) 豊田中央研究所)

e1308 @ mosk.tytlabs.co.jp

多様な構成要素が離散集合し構造を形成する複雑な系を扱う場合、電子状態計算や分子動力学計算などの微視的な手法のみを使って計算を行うことは事実上不可能であり、系の自由度の粗視化が必要である。近年、ミセルやベシクルをはじめとする様々な系に適用されている散逸動力学法 (DPD) がその代表例としてあげられる。しかし、その妥当性に関しては結果から評価する以外に無く、*ad hoc* である。本研究では微視的情報を粗視化シミュレーションに反映させる為に、射影演算子を用いて粗視化粒子に対する次のような運動方程式を導出し、分子レベルの微視的情報と粗視化されたメソレベルとの関係を示し、それに基づいて粗視化粒子間に働く平均力を分子動力学シミュレーションを用いて計算した。

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{P}}_{\sigma} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{R}}_{\sigma}} \ln \omega(\hat{\mathbf{R}}) - \beta \sum_{\alpha} \int_0^t ds \langle [\delta \mathbf{F}_{\sigma}^Q(t-s)] [\delta \mathbf{F}_{\alpha}^Q(0)]^T \rangle \frac{\hat{\mathbf{P}}_{\alpha}(s)}{M_{\alpha}} + \delta \mathbf{F}_{\sigma}^Q(t). \quad (1)$$

右辺第一項が粗視化粒子間平均力、第二項が摩擦力、第三項が遥動力に対応する。我々は方程式 (1) が遥動力の取り方によって、ブラウン動力学および散逸粒子動力学の方程式に帰着することを示した [1]。方程式 (1) では全ての項が微視的な情報と関連付けられている。粗視化粒子間に働く平均力は

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_{\sigma}} \ln \omega(\mathbf{R}) = \sum_{\alpha \neq \sigma} \langle \mathbf{f}_{\sigma\alpha} \rangle_{\Gamma_s} \quad (2)$$

と表される。ここで  $\mathbf{f}_{\sigma\alpha} \equiv \sum_{i,j} \mathbf{f}_{\sigma i, \alpha j}$  は粗視化粒子  $\sigma$  と  $\alpha$  の間に働く分子間相互作用の総和であり、また  $\langle \cdots \rangle_{\Gamma_s}$  は  $\hat{\Gamma}_s$  を固定した条件のもとでの平均を表す。 $\omega(\mathbf{R}) \equiv \langle \delta(\hat{\mathbf{R}} - \mathbf{R}) \rangle_{\text{eq}}$  は重心座標の平衡分布関数である。

ここでは Lennard-Jones 流体についてこのような拘束条件を課した分子動力学シミュレーションを行うことにより、粗視化粒子間の平均力を計算した。我々の方法では、粗視化粒子間の平均力は分子間力などの微視的な情報から直接的に求めることができる。分子動力学計算によって得られた粗視化粒子間の平均力を DPD で用いられる保存力と比較した結果を図 1 に示す。直接計算された粗視化粒子間平均力は DPD で使用されている保存力のおおよそ半分ほどの大きさになった。DPD で通常使われるモデルは非常に単純化されたものであり、定量的な議論には注意を要する。一方、分子動力学計算から直接求められた力は分子レベルの情報を取り込んでおり、これに基づいた粗視化モデルを構築すれば、微視的な情報を取り込んだ粗視化シミュレーションが可能になると期待される。

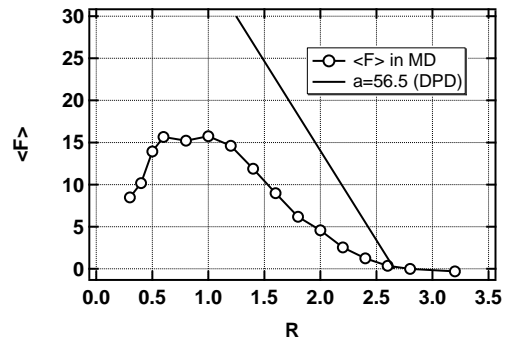


図 1: 散逸粒子動力学における保存力 (実線) と分子動力学計算によって直接求められた粗視化粒子間平均力 (印)

## 参考文献

- [1] T. Kinjo and S. Hyodo, Phys. Rev. E, (印刷中).